メ シ ア

量子力学

2

小出昭一郎
田村二郎 訳

東京図書株式会社

ALBERT MESSIAH

MÉCANIQUE QUANTIQUE

DUNOD Paris 1959

訳者まえがき

第1巻では主として量子力学の基本的骨組みの説明がなされたが，この第2巻では実用上で必要となるいろいろなテクニックが提供される．古典力学でもそうであるが，量子力学を用いて厳密に解くことのできる具体的な問題となるとかなり限定されている．自由粒子，ケプラー運動（水素原子，クーロン散乱），調和振動子などがそれである．

この第2巻の前半はこれらの問題の解法にあてられている．われわれが実際の問題を手がける場合には，さまざまな近似（第3巻で述べられる）を適用して複雑な問題を解きほぐし，上にあげたような簡単な問題の組み合わせに還元させるのが普通である．そういう意味で，ここで取り上げられている簡単な系の処理方法は，量子力学を諸問題に適用する際の基本的な道具となるもので，その適用範囲は想像以上に広い．というわけで，多くの初等的教科書がそのかなりのページをさいているのがこの部分なのである．本書では，特殊関数の導き方などのように単なる数学的な技術に関したことは付録にまわし，物理的に重要なことだけを本文に記す，という記述方法を採用している．これは，読者に余計な混乱を与えることを避け，全体の見通しをよくするための配慮で，本書の特色の一つである．

また，この第2巻の後半は，系の対称性と不変量（保存量）の関係にあてられる．これは一見抽象的のようにみえるが，物理学においては基礎的な考え方であり，その具体的な応用例とも言えるのが，角運動量の合成（第13章）と同種粒子系の扱い（第14章）である．どちらも初めて学ぶときにはすこし忍耐を要する部分であるが，量子力学を一応は知っているというだけの「しろうと」の域を脱して，それを具体的に道具として使う立場の「くろうと」になるためには，一度は通過せねばならぬ関門である．そのためのテキストとして，本書の記述はあまり細かすぎもせず，さりとて表面的で通りいっぺんでもなく，まことに繁簡よろしきを得た適切なものといえる．また最後の第15章に説明されている諸概念は，近年その重要性が増大してきたものである．最初のときにはとばしてつぎへ進んでもよいと書かれてあるが，この部分にこれだけ充実した説明のある点も，本書の特色の一つである．

相当に長い付録B－Dはいずれも数学的な公式集のようなもので，あとの参照のためには便利であろう．本書は読み捨てにする本ではない．辞書のように手もとにおいて必要に応じ参照してみるという類の書物である．そのためには，式などに誤植があっては読者に申しわけない．訳者もずい分注意をしたつもりではあるが，東京図書の松本重彰氏が丹念に原書と照合して下さらなかったら，もっと誤植の多い本になっていたにちがいない．この機会に同氏に厚く感謝の意を表したい．また，印刷所の方々にも，いろいろと厄介な注文をして手数をおかけしたことをお詫びしたい．

1972年1月

小出　昭一郎
田村　二郎

総 目 次

第 2 巻 目 次

第2部　簡単な系

第9章　変数分離によるシュレーディンガー方程式の解法．中心力ポテンシャル

第10章　散乱の問題．中心力ポテンシャルと位相のずれによる方法

第11章　クーロン相互作用

第12章　調和振動子

第3部 対称性と不変量

第13章 量子力学における角運動量

第14章　同種粒子系．パウリの排他原理

第15章　不変量と保存法則．時間反転

知恵は自分の家を建て
その七つの柱を立て
獣を屠り，酒を混ぜ合わせて
ふるまいを備え
はしためをつかわして
町の高い所で呼ばり言わせた
思慮のない者よ　ここに来れと

《箴言》IX，1－4

第2部

簡　単　な　系

《箴言（しんげん）》は旧約聖書の一部

第9章　変数分離によるシュレーディンガー方程式の解法．中心力ポテンシャル

§1.　序　説

一つの物理系の研究はその本質において，時間を含まないそのシュレーディンガー方程式を解くことにある．特に，この固有値方程式が直接に入ってくるのは，量子物理学において最も頻繁に見られるつぎの二つの型の問題である．すなわち

i)　束縛状態のエネルギー準位の決定：これはハミルトニアンのとびとびのスペクトルに属する固有値である．

ii)　衝突断面積の決定：のちに（第10章）示すように，これは非束縛状態に関する固有関数の漸近的な形から導かれる．

波動力学において，シュレーディンガー方程式は2階の偏微分方程式である．1次元の系に対しては，この方程式が〔常〕微分方程式になる．この簡単な場合の固有値問題の吟味はすでに行なった（第3章）．系の次元の数がもっと大きくなると，一般に問題はずっとむずかしくなる．それにもかかわらず，ハミルトニアンがもちうる対称の性質によって，この解法を容易にすることができる．特に，変数の変換を適当にすれば，変数が分離する偏微分方程式を導きうる場合もある．このときもとの固有値問題はいくつかの固有値問題に分かれ，それらに関係する次元の数はもとの問題より小さくなり，したがっていっそう簡単になる．

中心力ポテンシャル，すなわち力の中心からこの粒子までの距離rだけで決まり，この中心から粒子に至るベクトル$\boldsymbol{r}$の方向には無関係なポテンシャルのなかの1粒子の場合に，このことが起こる．ハミルトニアンは球対称性をもち，極座標によって問題を処理すれば変数は完全に分離する．シュレーディンガー方程式を解くことは，角の変数を分離したのち，動径変数だけに関する微分方程式を解くことになり，この方程式はいつでも数値的に積分することができる．

本章の大部分は中心力ポテンシャル内の1粒子のシュレーディンガー方程式の解法にあてられている．一般的な取り扱い方は第I節で与えられる．第II節は，自由粒子と《階段型》中心力ポテンシャル内の粒子の場合にあてられる．

変数分離についてもう一つのごく簡単な例が第III節の主題である．すなわち粒子系の重心の運動である．古典力学におけると同様に，一つ一つの粒子の他の粒子に対する相対的

な位置だけで相互作用が定められる限り，重心の運動は相対的な運動から分離される．

I．中心力ポテンシャル内の粒子．一般的な取り扱い

§2.　極座標によるハミルトニアンの式

本節では中心力ポテンシャル $V(r)$ のなかの質量 m の粒子のシュレーディンガー方程式を調べよう．この粒子の運動量を $\boldsymbol{p}$ とし，位置ベクトルを $\boldsymbol{r}$ とすれば，ハミルトニアンは

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r) \tag{1}$$

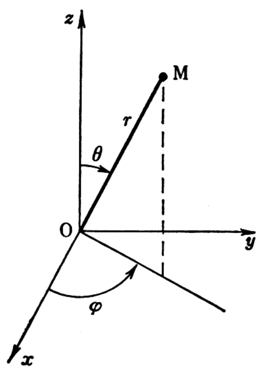
であり，時間を含まないシュレーディンガー方程式は

$$H\psi(\boldsymbol{r})\equiv\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+V(r)\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{2}$$

と書かれる．ハミルトニアンが球対称性をもつから，われわれは極座標によって研究する．

われわれが選ぶ極の軸は習慣どおり z 軸であり，デカルト座標 (x, y, z) は極座標 (r, θ, φ) の関数としてつぎの公式によって与えられる（9.1図を参照）：

$$\begin{cases} x=r\sin\theta\cos\varphi \\ y=r\sin\theta\sin\varphi \\ z=r\cos\theta. \end{cases} \tag{I}$$



9.1図　極座標とデカルト座標

ポテンシャル・エネルギー V の極座標による式はすでに与えられている．問題は運動エネルギー $\boldsymbol{p}^2/2m$ の式を見つけること，言いかえれば微分演算子

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

を極座標で表わすことである．変換の公式（I）を用いれば，微分法で慣用の技巧によって直接にこの式を求めることができる．計算は長いが重大な困難は現われないから，ここでは省略しよう．その代りに，結果の物理的意味をいっそうよく把握するため，運動エネルギー $\boldsymbol{p}^2/2m$ を微分演算子 $\partial/\partial r, \partial/\partial\theta, \partial/\partial\varphi$ そのものの関数として表わさず，これらの演算子からつくられ，物理的解釈がいっそう明瞭な別のエルミート演算子の関数として表わしてみよう．

たとえば，微分演算子 $\partial/\partial\varphi$ を直接に使うよりは，むしろ角運動量の z 軸に沿う成分を利用する方が意味をとりやすい．この成分は第5章（49）によれば，

$$l_z \equiv xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{3}$$

という具体的な形をもっている．$V(r)$ は φ によらないから，l_z がポテンシャル・エネルギーと交換することは明らかである．しかし l_z はまた運動エネルギー $p^2/2m$ とも交換する．このことは，l_z の定義そのものと基本交換関係

$$[r_i, p_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij} \tag{4}$$

を使えば容易に確かめることができる（問題4）[1]．したがって l_z はハミルトニアン H と交換する．極の軸を $\mathrm{O}x, \mathrm{O}y$ にとれば，l_x, l_y に対しても同じ結論に達する．それゆえ角運動量

$$\boldsymbol{l} \equiv \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\boldsymbol{r}\times\nabla) \tag{5}$$

の三つの成分 l_x, l_y, l_z はハミルトニアンと交換する．こういうわけで，われわれは微分演算子 $\partial/\partial\theta, \partial/\partial\varphi$ そのものよりむしろこれらの演算子を使うことにする．

同じ考え方から，われわれはエルミートでない演算子 $(\hbar/\mathrm{i})(\partial/\partial r)$ よりはむしろ動径運動量

$$p_r \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right) \tag{6}$$

を用いる（問題1を参照）．

p_r のエルミートであるという性質をはっきりさせるために，任意の二乗積分可能な関数を $\psi(\boldsymbol{r})$ とするとき，どんな条件の下に式 $\langle\psi, p_r\psi\rangle$ が実数になるかを調べよう．必要なことは，

$$0 = \langle\psi, p_r\psi\rangle - \langle\psi, p_r\psi\rangle^* \equiv \int [\psi^*(p_r\psi) - (p_r\psi)^*\psi]\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$
$$= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int_0^\pi \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^\infty\left[\frac{\partial}{\partial r}|r\psi|^2\right]\mathrm{d}r.$$

$r\to\infty$ のとき $r\psi$ は消えるから，r に関する積分は原点における $|r\psi|^2$ の値に等しい．それゆえ条件

$$\lim_{r\to 0} r\psi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{7}$$

にしたがう二乗積分可能な関数に制限したときだけ演算子 p_r はエルミートになる[2]．

---

[1] 今後はつねに指数 $i, j = 1, 2, 3$ を用いて，それぞれ軸 $\mathrm{O}x, \mathrm{O}y, \mathrm{O}z$ 方向のベクトルの成分を表わす．たとえば $r_1 = x$，$p_1 \equiv p_x$ など．

[2] p_r はエルミートであるがオブザーバブルではない．どんな定数 ϖ に対しても，微分方程式

$$p_r f(r) \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(rf(r)) = \varpi f(r)$$

の解は定数を除いて $\exp(\mathrm{i}\,\varpi r/\hbar)/r$ である．これはけっして条件（7）を満たさない．したがって p_r の固有値問題は一つも解をもたない．

定義そのものから得られる結果として，p_r は θ と φ のどんな関数とも交換し，$\boldsymbol{l}$ の三つの成分とも交換するが，他方では

$$[r, p_r] = \mathrm{i}\hbar. \tag{8}$$

演算子のあいだには恒等式

$$\boxed{\boldsymbol{p}^2 = p_r^2 + \frac{\boldsymbol{l}^2}{r^2} \qquad (r \neq 0)} \tag{9}$$

が成り立ち，これによると，演算子 $\boldsymbol{p}^2$ と $p_r^2+(\boldsymbol{l}^2/r^2)$ の，関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ に対する作用は，r が0でない任意の値をとるとき，同じ結果を与える．

これを証明するために，$\boldsymbol{l}^2$ の計算に恒等式

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})^2 = A^2B^2-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})^2$$

を利用し，ベクトル $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ のところに演算子 $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}$ を代入する．ただし，$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ の成分は必ずしも互いに交換しないから，上の等式がこの場合にも成り立つためには，演算子の順序を保たなければならない．すなわち

$$\boldsymbol{l}^2 \equiv (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) = \sum_{i,j}(r_ip_jr_ip_j - r_ip_jr_jp_i).$$

交換関係（4）を繰り返し使えば，この等式は

$$\boldsymbol{l}^2 = r^2\boldsymbol{p}^2-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2+\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) \tag{10}$$

と書き直される．ところで，$r = (x^2+y^2+z^2)^{1/2}$ であるから，

$$x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z} = r\frac{\partial}{\partial r}$$

が成り立ち，したがって

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} = r\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial r} = rp_r+\mathrm{i}\hbar$$

となり，交換関係（8）を考慮すれば，

$$(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2-\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) \equiv ((\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})-\mathrm{i}\hbar)(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) = rp_r(rp_r+\mathrm{i}\hbar) = r^2p_r^2.$$

したがって等式（10）の右辺は

$$r^2(\boldsymbol{p}^2-p_r^2)$$

に等しい．両辺を r^2 で割れば等式（9）が得られ，これは $r=0$ を除きさえすればいたるところで成り立つ．

（9）から，両辺を $2m$ で割ることによって，運動エネルギーの式が導き出される．こうして極座標によるハミルトニアンの表現式

$$H = \frac{p_r^2}{2m}+\frac{\boldsymbol{l}^2}{2mr^2}+V(r) \tag{11}$$

を得る．対応する古典粒子のエネルギーと同じように，これは三つの項，すなわち《動径運動エネルギー》$p_r^2/2m$，《回転運動エネルギー》$\boldsymbol{l}^2/2mr^2$（mr^2 は原点に関する慣性モ

ーメントである）およびポテンシャル・エネルギー $V(r)$ の和である．

この§2の初めに注意した直接の計算によっても，明らかに同じ式に到達するであろう．このとき l^2 は

$$l^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \tag{12}$$

という具体的な形で現われる．

結論として，シュレーディンガー方程式は極座標により，

$$\left[\frac{p_r^2}{2m}+\frac{l^2}{2mr^2}+V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \tag{13}$$

と書かれる．しかし，この方程式の解も，原点における挙動を調べてからでなければ，シュレーディンガー方程式の解として採用することはできない．実際，演算子 H が作用する任意の関数に対して，(11) が原点においても正しいということは自動的に保証されているのではない．ここでは，ψ が条件 (7)，すなわち p_r がエルミートであるための条件を満たす限り，方程式 (13) は原点を含む全空間においてシュレーディンガー方程式と同値であるということを証明なしで指摘するだけにしておこう．

§3. 角変数の分離．球面調和関数

(11) と (12) から H と l^2 の交換することが容易にわかる．これは予想されていたことである．すなわち H が l_x, l_y, l_z と交換する以上，これらの演算子のどんな関数とも交換し，特に l^2 と交換する．オブザーバブル H と l^2 は（少なくとも）一つの基底系を共有する．そこでわれわれは H の固有値問題をつぎの二つの段階に分けて解くことを考える．すなわち，まず l^2 の固有値問題を解き，ついでシュレーディンガー方程式を満たす l^2 の固有解を求める．ポテンシャル $V(r)$ の特殊な形はこの解法の第2の段階で初めて関係してくる．

l^2 の固有関数の完全系を求める場合，演算子 l^2 は角変数 θ と φ だけに作用するから，変数 r は単なるパラメータの役割を演じ，しばらくこれを考慮しなくてもよい．

l^2 は角運動量の各成分と交換する（第5章 (70)）から，特に l_z と交換する．〔特殊〕関数論において示されるように，(12) と (3) によってそれぞれ定められる微分演算子 l^2 と l_z に共通の固有関数は，球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ である．これらの関数の主な性質は付録B（§10）にまとめられている．その構成は，量子力学における角運動量の体系的な研究を行なうとき（第13章）詳しく説明されよう．これらは指数 l と m によってしるしづけられ，l は0またはすべての正の整数値をとることができ，m は区間 $(-l, +l)$ の両端を含むすべての整数値をとりうる．これらに対して

$$l^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{14}$$

$$l_z Y_l^m(\theta,\varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{15}$$

$$(l = 0, 1, 2, \cdots, \infty;\ m = -l, -l+1, \cdots, +l).$$

二乗積分可能な (θ, φ) の関数がつくる空間，すなわち半径1の球面上で定義された二乗積分可能な関数の空間において，球面調和関数は完全直交規格化系をつくる．注意しなければならないのは，この場合の内積が半径1の球面上の積分によって定義されており，面積要素は

$$\mathrm{d}\Omega = \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi$$

となることである(3)．それゆえ直交規格化関係は

$$\int Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'}\,\mathrm{d}\Omega \equiv \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\, Y_l^{m*}(\theta,\varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{16}$$

と書かれる．

量子数の対 (lm) ごとに，それぞれただ一つの球面調和関数が対応する．したがって，関数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ が l^2 および l_z に共通の固有関数であり，それぞれ固有値 $l(l+1)\hbar$ と $m\hbar$ に対応するものとすれば，角に対する依存関係は明確に定められる．すなわち関数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ は必然的に $f(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$ の形をとる．

§ 4.　動径方程式

すでにわれわれはこの方法の第2段階に到達し，シュレーディンガー方程式を解くことになった．それは H, l^2, l_z と交換する演算子に共通の固有関数をつくることである．この関数はシュレーディンガー方程式の解で，

$$\psi_l^m(r,\theta,\varphi) = Y_l^m(\theta,\varphi)\chi_l(r) \tag{17}$$

の形のものである．ψ_l^m が方程式 (13) の解であり，Y_l^m が l^2 の固有関数である（式(14)）ということから，$\chi_l(r)$ は2階線形微分方程式

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E\right]\chi_l(r) = 0 \tag{18}$$

の解である．ただし $p_r^2 \equiv -\hbar^2(1/r)(\mathrm{d}^2/\mathrm{d}r^2)r$.

ここで

$$y_l(r) = r\chi_l(r) \tag{19}$$

と置き，方程式 (18) をこれと同値な動径方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E\right]y_l(r) = 0 \tag{20}$$

に換えるとつごうがよい．これと1次元のシュレーディンガー方程式との類似が注目され

(3)　第7章§13の終りの議論を参照．表現 (θ,φ) における完全性の関係を書くときにも同様の注意を必要とする（付録Bの (88)）．

よう．さらに注意したいのは，φ_l^m のノルムが角に関する積分ののち，式

$$\langle\varphi_l^m, \varphi_l^m\rangle = \int_0^\infty r^2|\chi_l(r)|^2\,\mathrm{d}r = \int_0^\infty |y_l(r)|^2\,\mathrm{d}r \tag{21}$$

で与えられること，また p_r がエルミートであるための条件（7）は条件

$$y_l(0) = 0 \tag{22}$$

と同値になることである．

動径方程式（20）の解を全部採用するわけにはゆかない．φ_l^m が固有関数として許されるためには，y_l が正則性に関するいくつかの条件を満たさなければならない．事実，つぎのことが必要である：

a) y_l の原点における挙動を調べて，φ_l^m が実際に，原点を含む全空間においてシュレーディンガー方程式の解になっていることを確かめる．

b) この解が（第1巻154頁に定めた一般の意味で）規格化できることを確かめる．

これらの正則性の条件をはっきりさせるために，方程式（20）の解の原点における挙動を系統的に調べよう．

$V(r)$ はどの有限区間においても有界であるが，原点の近くは例外であって，ここでは $1/r$ のような特異性を示すこともありうると仮定する．これらの条件は実際的な興味のある場合にいつでも満たされる．この仮定の下に，方程式（20）は原点において r^{l+1} のように0になる一つの《正則な》解 R_l をもつ（これは定数を除いて定まる）．そしてこの方程式の解で R_l 以外のものはすべて原点において $(1/r)^l$ のように振舞う[4]．

このことを示すために，$V(r)$ は原点の近くで解析的であると仮定し，

$$r^s(1+a_1r+a_2r^2+\cdots)$$

という形の特殊解をつくってみよう．この展開と，これから導き出される第2階導関数の展開と，$V(r)$ のテイラー展開を方程式（20）に代入し，左辺に現われる r の累乗の係数をつぎつぎに0と置けば，方程式の無限列が得られ，最初の方程式（決定方程式）

$$s(s-1)-l(l+1) = 0$$

によって s が決められ，その後の方程式によってつぎつぎに $a_1, a_2, \cdots$ が定まる．いまの場合，s の方程式は二つの解 $l+1$ と $-l$ をもつ．$s = l+1$ のときは，この級数の計算がどこまでもつづけられ，その結果《正則》解 R_l が得られる．$s = -l$ のときは，解けない式にぶつかり，この方法は挫折する．しかし，R_l を方程式（20）の解とするとき，

---

(4) このことはそれほど驚くべきことではない．方程式（20）の一般解は原点の近くで近似的に方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]v(r) = 0$$

の解であり，この方程式の一般解は $v(r) = ar^{l+1}+br^{-l}$ (a, b は任意の定数）となるからである．

容易にわかるように関数

$$R_l(r)\int^r \frac{\mathrm{d}r'}{R_l^2(r')}$$

もまたこの方程式の解であり，この関数は原点において $(1/r)^l$ のように振舞う．一般解はこれら二つの特殊解の線形結合である．

ところで，$(1/r)^l$ のような解はすべて捨てなければならない．これらは条件 a)，b) のうち少なくとも一つを満たさないからである．

実際，$l \neq 0$ ならば，その絶対値の二乗の積分は原点で発散し，(21) により，この解からつくられる関数 ψ_l^m はヒルベルト空間に属さない（条件 b)）．さらに，ψ_l^m の固有微分をつくっても，やはり原点における発散は解消しない．したがって，固有値 E がとびとびのスペクトルに属しても連続スペクトルに属しても，この解はつねに捨てられなければならない．

$l=0$ のときには上の議論はあてはまらない．しかしこの場合には，対応する波動関数 ψ_0 がシュレーディンガー方程式を満たさない（条件 a)）．実際，ψ_0 は原点において $(1/r)$ のように振舞い，$\triangle(1/r) = -4\pi\delta(r)$ である（付録 A の (12)）から，

$$(H-E)\psi_0 = \ = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\delta(r).$$

それゆえ，残さなければならないのは，《正則な》解，あるいは同じことであるが，原点において条件 (22) を満たす解だけである．このような解によれば，確かに関数 ψ_l^m は原点をも含めていたるところでシュレーディンガー方程式の解になっている（条件 a)）．また，規格化の積分が原点で収束するから，ψ_l^m またはその固有微分がヒルベルト空間に属するという条件（条件 b)）は，この解の無限遠における挙動だけで決まる．

原点における条件

$$y_l(0) = 0 \tag{22}$$

を補えば，動径方程式 (20) は質量 m の1粒子の1次元シュレーディンガー方程式であり，この粒子は領域 $(0,\infty)$ においてポテンシャル $V(r)+(l(l+1)\hbar^2/2mr^2)$ にしたがい，領域 $(-\infty,0)$ において無限大の斥力ポテンシャルにしたがう．こうして，3次元のシュレーディンガー方程式を解くことが1次元のシュレーディンガー方程式を解くことに帰着する．第3章で述べた性質（ロンスキアンの性質，解の漸近的挙動，直交関係，など）は，《同値ポテンシャル》が原点において $l(l+1)/r^2$ という特異性をもつにもかかわらず，この場合にもそのまま成り立つ．

§5.　動径方程式の固有解．スペクトルの性質

与えられた l の値に対応する動径方程式 (20) のエネルギー・スペクトルと固有解の性

質は，この方程式の原点において正則な解の漸近的挙動を調べることによって導き出される．第3章§10の議論はここでもそのまま繰り返される．

たとえば，$V(r)$ が漸近的に $1/r$ より速く0に収束すると仮定する．すなわち

$$\lim_{r\to\infty} rV(r) = 0.$$

エネルギー・スペクトルは二つの部分を含む：

i) $E<0$ のとき，

原点で正則な解は，一般にその絶対値が $e^{\kappa r}$ $(\kappa=\sqrt{-2mE}/\hbar)$ のように限りなく増加するが，例外として，あるとびとびの値 $E_l^{(1)}, E_l^{(2)}, \cdots$ があり，これらに対しては

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} e^{-\kappa r}.$$

これらの値だけが固有値として許される．これらの一つ一つにノルムの有限な動径関数が一つずつ対応する．

ii) $E>0$ のとき，

原点で正則な解は限りなく振動し，法則

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l\right) \qquad \left(k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)$$

にしたがう．どんな E についても，これは固有解として許され，非束縛固有状態を表わす．定数 δ_l は**位相** (phase) または**位相のずれ** (déphasage) と呼ばれる（付加項 $-l\pi/2$ は，$V(r)=0$ のとき $\delta_l=0$ とするためにつけ加えたのである．§7を参照）．δ_l はきわめて重要な量である．これは正則な解の漸近的な挙動を特徴づけ，またそういう量として衝突の問題に絶えず入ってくる（第10章）．

$r\to\infty$ のとき V が $1/r$ と同じ速さか，またはもっと遅く（しかし単調に）0に近づく場合は，まえと同じように簡単な漸近形を書き表わすことはできないけれども，スペクトルの性質に関する本質的な結果は保たれる．これは縮退のまったくないスペクトルで，連続な部分すなわち正のエネルギーを表わす半直線と，とびとびの負の値をとる（可算無限）列から成る．

与えられた l の値に対して，このようにつくられた固有関数 $y_l(r)$ の全体が完全系をつくることはまだ示されていない．その意味は，半直線 $(0,\infty)$ で定義され，二乗積分可能な r の関数はすべてこれらの固有関数によって級数に展開されるということである．われわれが取り扱うポテンシャルの形については，いつでもうまくこうなっていると仮定しよう．そうでないときには，ハミルトニアン H がオブザーバブルではなくなってしまうであろう．

§6. 結　　び

結論として，オブザーバブル H, l^2, l_z が交換するオブザーバブルの完全集合をつくるということをわれわれは認める．H, l^2, l_z に共通な固有関数を構成するという問題は，シュレーディンガー方程式において角変数と動径変数とを分離することに帰着する．l^2 と l_z のそれぞれの固有値 $l(l+1)\hbar^2$ と $m\hbar$ を決めると，固有関数は

$$\psi_l^m = y_l(r) Y_l^m(\theta, \varphi)/r \tag{23}$$

の形となり，$y_l(r)$ は動径方程式 (20) の解のうち，原点では0となり，全空間で有界なものである．

ふつうこのような固有関数は角運動量 l の状態，あるいはもっと詳しく，粒子が角運動量 l と z 軸方向の成分 m をもつ状態を表わすという．l と m は整数で

$$l \geqslant 0, \qquad -l \leqslant m \leqslant l$$

であることを思い出しておこう．スペクトル分析の伝統的な用語によれば，l は**方位量子数**，m は**磁気量子数**と名づけられている．また伝統にしたがえば，いくつかの最も低い角運動量の状態は方位量子数の値よりもむしろ特殊なアルファベット文字によって表わされる．角運動量の値 $0, 1, 2, 3, 4, 5, \cdots$ にはそれぞれ文字 $s, p, d, f, g, h, \cdots$ が対応する．

H のスペクトルの性質は $V(r)$ の無限遠における挙動によって決まる．特に，$V(r)$ が（単調に）0に近づくときには，エネルギー・スペクトルはいくつかの負のとびとびの値と，正の値の（連続な）全体とから成る．

連続スペクトルの値はそれぞれ無限に縮退している．実際，角運動量のとりうるすべての値 (lm) に対して，正のエネルギー E の固有関数が一つ存在する．

とびとびのスペクトルに属するエネルギー E_{kl} は二つの指数，すなわち方位量子数 l と動径量子数 k によってしるしづけられる．これらの指数によって，与えられた角運動量に対する動径方程式のいろいろな固有値が区別される．いくつかの異なる l の値に対する動径方程式が共通の固有値をもつという先験的な理由は何もない．すなわち，一般には，固有値 E_{kl} はすべて異なり，それぞれ $(2l+1)$ 重に縮退している．なぜならその一つ一つに，磁気量子数のとりうる値

$$-l, -l+1, \cdots, +l$$

の個数と同じ個数の線形独立な固有関数が対応するからである．あるきわめて特殊な形のポテンシャル $V(r)$ に対しては，これらの値 E_{kl} のうちのいくつかが一致するということも起こりうる．この場合には縮退が増す．この型の偶発的な縮退は水素原子（第11章）および3次元等方性調和振動子（第12章）を取り扱うときに見いだされよう．

II. 中心力井戸型ポテンシャル．自由粒子

§ 7. 球ベッセル関数

区間 $(0,\infty)$ のなかにポテンシャル $V(r)$ が定数，つまり

$$V(r) = V_0 = \text{定数}$$

となるような領域がいくつかあるとき，ここで動径方程式は特に簡単な形をとり，その一般解は関数論でよく知られた関数，すなわち球ベッセル関数の線形結合である．

まず $E > V_0$ としよう．

$$k = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}, \qquad \rho = kr \tag{24}$$

と置けば，方程式 (20) は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\left(1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right]y_l = 0$$

という形に書かれる．同じようにして，動径関数 $f_l = y_l/r$ を ρ の関数とみなせば，f_l は《球ベッセル微分方程式》

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\left(1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right]f_l = 0 \tag{25}$$

の解である．方程式 (25) の一般解は二つの特殊解の線形結合になる．最も よく用いられる特殊解を付録 B (§6) に書いておいた．それは関数 j_l, n_l(5), $h_l^{(+)}, h_l^{(-)}$ である．j_l は原点で正則な（ρ^l のように振舞う）ただ一つの解である．他の三つは原点で $(l+1)$ 位の極をもつ．j_l と n_l は実関数であり，無限遠において定常波の挙動

$$j_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\sin(\rho-l\pi/2)}{\rho}, \qquad n_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\cos(\rho-l\pi/2)}{\rho} \tag{26}$$

を示す．関数 $h_l^{(+)} \equiv n_l+\mathrm{i}j_l$ と $h_l^{(-)} \equiv n_l-\mathrm{i}j_l$ はそれぞれ出てゆく波と入ってくる波の漸近的挙動

$$h_l^{(+)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\rho-l\pi/2)}}{\rho}, \qquad h_l^{(-)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\rho-l\pi/2)}}{\rho} \tag{27}$$

を示す．

$E < V_0$ の場合には，

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \tag{28}$$

と置き，上記の k をすべて $\mathrm{i}\kappa$ に置き換えさえすれば，いま述べたことはすべて成り立つ．特に，漸近式 (26) と (27) はそのまま有効である．無限遠において有界な動径方程

(5) 大多数の書物では同じ関数の符号を変えたものを n_l で表わしている．

式の解は関数 $h_l^{(+)}(\mathrm{i}\kappa r)$ だけである．これは無限遠で指数関数的に0に近づく．もっと詳しく言えば，関数 $\mathrm{i}^l h_l^{(+)}(\mathrm{i}\kappa r)$ は実関数で，$(1/\kappa r)$ の l 次式に $(\mathrm{e}^{-\kappa r}/\kappa r)$ を掛けた積に等しく，その漸近式は

$$\mathrm{i}^l h_l^{(+)}(\mathrm{i}\kappa r) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{\mathrm{e}^{-\kappa r}}{\kappa r}. \tag{29}$$

§ 8.　自由粒子．平面波と自由球面波

上記の考察は特に自由粒子にあてはまる．この場合は全区間 $(0,\infty)$ において $V(r)=0$ であり，ハミルトニアンは運動エネルギーの項

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$$

だけになる．

そこで $H, \boldsymbol{l}^2$，および l_z に共通な固有解を求めよう．角運動量が (lm) で，エネルギーが E のとき，解は

$$Y_l^m(\theta,\varphi)f_l(r)$$

という形の関数であり，f_l は全区間 $(0,\infty)$ で有界な方程式 (25) の解である．

$E<0$ のときは，無限遠で有界なただ一つの解 $h_l^{(+)}(\mathrm{i}\kappa r)$ が原点で $(l+1)$ 位の極をもち，固有値問題は解をもたない．予期されたとおり，負のエネルギーの固有状態は存在しないのである．

$E>0$ のときは，方程式 (25) がいたるところで有界なただ一つの解として関数 $j_l(kr)$ をもつ．したがって，エネルギーの正の値 $E=\hbar^2k^2/2m$ の一つ一つに対して，角運動量 (lm) の固有解が存在し，それは関数

$$Y_l^m(\theta,\varphi)j_l(kr) \tag{30}$$

である．

こうしてつくられた各固有解は，二つのとびとびの指数 l, m と連続な指数 k によってしるしづけられ，k は区間 $(0,\infty)$ のなかのすべての値をとることができる．これらの球面波の全体は完全直交規格化系をつくる（問題3を参照）．

平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ の全体は，自由粒子のエネルギーの固有関数から成るもう一つの完全直交規格化系をつくる．これらはオブザーバブル p_x, p_y, p_z に共通な固有関数，すなわち運動量 $\boldsymbol{p}$ のはっきり決まった値に対応する解である．各平面波は三つの連続なパラメータすなわちベクトル $\boldsymbol{k}$ の3成分によって定められ，これらのパラメータは $-\infty$ から $+\infty$ までのすべての値をとることができる．

波動 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ は運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$，エネルギー $E=\hbar^2k^2/2m$ の自由粒子を表わす．しかしこの波動は，はっきり決まった角運動量をもつ状態を表わさない．それはちょうど，球面波

(30) がはっきり決まった運動量をもつ状態を表わさないのと同じである．運動量の3成分 p_x, p_y, p_z は同時に l^2 および l_z と交換しないから，このことは不思議でない．

§ 9. 球面調和関数による平面波の展開

自由粒子のエネルギーの各固有値は無限に縮退している．球面波 (30) は完全系をつくるから，波数 k の与えられた値に対応する可算個の球面波の全体は，エネルギー $E = \hbar^2k^2/2m$ の固有関数から成る部分空間を張る．したがって，平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ はこれらの関数の級数に展開される．すなわち，

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} a_{lm}(k)\, Y_l^m(\theta,\varphi)\, j_l(kr). \tag{31}$$

z 軸を $\boldsymbol{k}$ の方向にとれば，この波動は $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta}$ の形をとって φ に無関係となり，展開式 (31) は $m = 0$ の項しか含まない[6]．

$$\rho = kr, \qquad u = \cos\theta$$

と置けば，平面波の展開式はルジャンドルの多項式（付録 B (94) を参照）による級数展開

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho u} = \sum_{l=0}^{\infty} c_l j_l(\rho) P_l(u) \tag{32}$$

に帰着する．

係数 c_l を定めるために，つぎのような方法がとられる．級数 (32) を ρ に関して項ごとに微分すると，

$$\mathrm{i}u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho u} = \sum_l c_l \frac{\mathrm{d}j_l}{\mathrm{d}\rho} P_l \tag{33}$$

となる．しかしこの展開はまた，ルジャンドルの多項式の漸化式（付録 B (78)）を考慮に入れると，

$$\mathrm{i}u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho u} = \mathrm{i}\sum_l c_l j_l u P_l = \mathrm{i}\sum_l \left(\frac{l+1}{2l+3} c_{l+1} j_{l+1} + \frac{l}{2l-1} c_{l-1} j_{l-1}\right) P_l \tag{34}$$

とも書かれる．展開式 (33) と (34) における P_l の係数を等しいと置き，球ベッセル関数の漸化式（付録 B の (53)，(54)）を用いると，関係式

$$l\left(\frac{1}{2l+1}c_l - \frac{\mathrm{i}}{2l-1}c_{l-1}\right) j_{l-1}(\rho) = (l+1)\left(\frac{1}{2l+1}c_l + \frac{\mathrm{i}}{2l+3}c_{l+1}\right) j_{l+1}(\rho)$$

を得る．これが任意の ρ に対して満たされるためには，括弧のなかの式がすべて0になることが必要十分である．それゆえ

$$\frac{1}{2l+3}c_{l+1} = \frac{\mathrm{i}}{2l+1}c_l \qquad (l = 0, 1, 2, \cdots, \infty)$$

---

[6] 事実，$l_z \exp(\mathrm{i}kr\cos\theta) = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\exp(\mathrm{i}kr\cos\theta) = 0.$

すなわち

$$c_l = (2l+1)\mathrm{i}^l c_0.$$

係数 c_0 を得るには，$\rho=0$ における展開式 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho u}$ を書いてみればよい．$j_l(0)=\delta_{l0}$ であるから $c_0=1$.

結局，平面波の展開式は

$$\boxed{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)P_l(\cos\theta)} \qquad (35)$$

と書かれる．

任意の極座標系に関してこの展開を求めるには，展開式 (35) に現われる角 θ がベクトル $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{r}$ のあいだの角であることに注意する．これらのベクトルの角座標をそれぞれ $\hat{\boldsymbol{k}}$, $\hat{\boldsymbol{r}}$ で表わそう．球面調和関数の加法定理（付録 B (98)）によれば，

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}).$$

この式を展開式 (35) に代入して

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\mathrm{i}^l j_l(kr) Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}) \qquad (36)$$

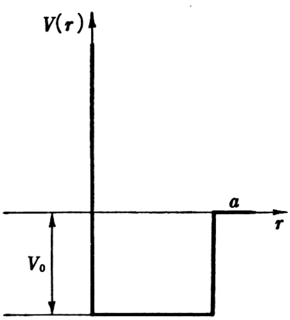
を得る．

§ 10.　球形の箱の研究

中心力の場における1粒子の問題を明らかにするために，《球形の箱》(9·2 図)

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r<a) \\ 0 & (r>a) \end{cases} \qquad (37)$$

を取り扱う．



9·2 図　球形の箱（球対称な井戸型ポテンシャル）

動径方程式の解法は1次元井戸型ポテンシャルの場合とまったく同様である．二つの区域 $(0,a)$, (a,∞) の一つ一つにおいて，シュレーディンガー方程式の一般解を書くことができる．それは球ベッセル関数の線形結合である．原点と無限遠において正則であるという条件，および点 $r=a$ において関数とその対数導関数が連続であるという条件によって，許される解を決めることができる．

この粒子のエネルギーを E とする．$K=[2m(E+V_0)]^{1/2}/\hbar$ と置こう．内部の区域 $(0<r<a)$ で動径方程式は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\left(K^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\right]f_l(r)=0$$

と書かれる．$\rho = Kr$ と置けば，方程式 (25) がふたたび得られる．原点において正則な解は

$$Aj_l(Kr) \qquad (A \text{ は規格化の定数})$$

だけしかない．

外部の区域 $(r > a)$ で，シュレーディンガー方程式は自由粒子の方程式である．$E \lessgtr 0$ にしたがって二つの場合を考える必要がある．

A) $E < 0$. とびとびのスペクトル，束縛状態.

$\kappa = (-2mE)^{1/2}/\hbar$ と置く．無限遠において有界なただ一つの解は指数関数的に減少する解 $Bh_l^{(+)}(i\kappa r)$ であり，これは束縛状態の特徴を示す．$r = a$ においてこの関数が連続であるという条件から，比 B/A が定められる．対数導関数が連続であることから，

$$\frac{1}{h_l^{(+)}(i\kappa r)}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}h_l^{(+)}(i\kappa r)\right)\bigg|_{r=a} = \frac{1}{j_l(Kr)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}j_l(Kr)\bigg|_{r=a} \tag{38}$$

が得られる．この条件が満たされるのは，E があるとびとびの値をとったときだけである．これによって，問題の箱のなかにある粒子の束縛状態におけるエネルギー準位が定められる．s 状態 $(l = 0)$ について言えば，この方程式は簡単に

$$-\kappa a = Ka \cot Ka \tag{38 a}$$

と書かれる．これは，わずかな相違を除けば，第3章§6の1次元の問題に関する式(18)に等しい．この方程式の根の数と解の節の数とに関する議論は，ここでも大きな変更をせずに繰り返される．角運動量の準位がもっと高いときにも，同じような議論をすることができる（問題5）．

B) $E > 0$. 連続なスペクトル，非束縛状態.

$k = (2mE)^{1/2}/\hbar$ と置く．外部の区域におけるシュレーディンガー方程式の一般解はいたるところで有界である．それは $j_l(kr)$ と $n_l(kr)$ の線形結合である．点 $r = a$ における連続の条件によって，固有関数として許される線形結合の係数が定められる．それゆえ E の任意の値に（定数を除いて）ただ一つの波動関数が対応する．

外部の解を

$$B(\cos\delta_l \cdot j_l(kr) + \sin\delta_l \cdot n_l(kr)) \tag{39}$$

という形に書けば，$r = a$ における関数の連続条件により比 B/A が決められる．δ_l は対数導関数の連続条件

$$\frac{Kj'_l(Ka)}{j_l(Ka)} = k\frac{\cos\delta_l \cdot j'_l(ka) + \sin\delta_l \cdot n'_l(ka)}{\cos\delta_l \cdot j_l(ka) + \sin\delta_l \cdot n_l(ka)} \tag{40}$$

によって定められ，これは実の量である．さらに δ_l は，角運動量 l をもつ球面波の位相のずれである．実際，(26) を使えば容易に確かめられるように，解 (39) の漸近式は

$$B\frac{\sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l\right)}{kr}$$

である．

s 波の場合には，方程式 (40) はきわめて単純な形

$$K\cot Ka = k\cot(ka+\delta_0) \tag{40 a}$$

をとる．

III.　2体問題．重心運動の分離

§ 11.　古典力学における重心運動の分離

量子力学における2粒子系の研究は6次元の問題である．それにもかかわらず，二つの粒子の受ける相互作用が両者のあいだの相互作用に限られ，しかもそれが相対的な位置 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ だけで決まるときには，上記の問題は二つの3次元の問題に分かれる．すなわち1自由粒子の問題と静的なポテンシャル内の1粒子の問題である．これら二つの粒子の質量をそれぞれ m_1, m_2，運動量を $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2$，位置を $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ としよう．ここで考えられている系のハミルトニアンは

$$H\equiv\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1}+\frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2}+V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) \tag{41}$$

という形である．これを取り扱う方法は，対応する古典的な取り扱い方とまったく同じように，重心の運動を相対的な運動から分離することである．

ハミルトンの形式論において古典的な取り扱い方がどのようになされるかを簡単に復習しよう．

$$\begin{aligned} &M=m_1+m_2, \qquad \boldsymbol{R}=\frac{m_1\boldsymbol{r}_1+m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1+m_2}, \qquad \boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2, \\ &m=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}, \qquad \boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2, \qquad \boldsymbol{p}=\frac{m_2\boldsymbol{p}_1-m_1\boldsymbol{p}_2}{m_1+m_2} \end{aligned} \tag{II}$$

と置く．力学変数の変換 (II) により，2粒子の運動が二つの仮想的な粒子の運動によって表わされる．一つは**重心**で，その位置は $\boldsymbol{R}$ である．その運動量 $\boldsymbol{P}$ は系の全運動量であり，その質量 M は全質量である．もう一つは相対運動に結びついた粒子である．その位置 $\boldsymbol{r}$ は第2の粒子に対する第1の粒子の相対的位置であり，その速度 $\boldsymbol{p}/m$ は相対速度 $(\boldsymbol{p}_1/m_1)-(\boldsymbol{p}_2/m_2)$ に等しい．この**相対粒子**の質量 m は**換算質量**と呼ばれている．

ついでながら変換 (II) の注目すべき性質をいくつかあげておく：

$$m_1m_2=mM \tag{42 a}$$

$$\frac{p_1^2}{2m_1}+\frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{p^2}{2m}+\frac{P^2}{2M} \tag{42 b}$$

$$m_1r_1^2+m_2r_2^2 = mr^2+MR^2 \tag{42 c}$$

$$p_1\cdot r_1+p_2\cdot r_2 = p\cdot r+P\cdot R \tag{42 d}$$

$$l_1+l_2 = l+L. \tag{42 e}$$

(42 e) では，二つの粒子の角運動量 l_1, l_2 と，相対粒子の角運動量 $l = r\times p$，重心の角運動量 $L = R\times P$ を導入した.

容易にわかるように，この変換はポアッソンの括弧式を保存する．すなわち正準変換である．したがって，新しい変数の運動方程式は，新変数の関数とみなされたハミルトン関数，すなわち

$$H = \frac{P^2}{2M}+\frac{p^2}{2m}+V(r) \tag{43}$$

から得られる正準方程式である．それは

$$\dot{R} = \frac{P}{M}, \qquad \dot{P} = 0, \qquad \dot{r} = \frac{p}{m}, \qquad \dot{p} = -\mathrm{grad}\, V.$$

重心と相対粒子の運動方程式は完全に分離される．重心の運動は一様な直線運動，質量 M の自由粒子の運動である．相対粒子の運動はポテンシャル $V(r)$ 内における質量 m の粒子の運動である.

§ 12. 2粒子から成る量子系の重心運動の分離

同じ問題を量子力学において取り扱うため，同じ仕方で新しい力学変数 r, R, p, P を導入し，これらを式（II）により古い変数の関数として定義する．(41) により古い変数の関数として与えられたハミルトニアンは，新しい変数の関数として (43) の形をとる．さらに，新しい変数の満たす交換関係は，これらが二つの粒子を表わす場合と同じであり，二つの粒子の位置はそれぞれ r と R，運動量は p と P である．すなわち，0でない交換子は

$$[r_j, p_j] = i\hbar, \qquad [R_j, P_j] = i\hbar \qquad (j = x, y, z)$$

だけである．これらの性質はいずれも式（II）に基づいて容易に確かめられる代数的性質である.

同様に (42) は——(42 e) をも含めて——そこに現われる演算子の順序を変える必要もなく，量子論においてそのまま成り立つことが確かめられる.

新しい変数の関数として表わせば，H は二つの項の和

$$H = H_R+H_r$$

となり，第1項

$$H_R=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}$$

は重心の変数しか含まず，第2項

$$H_r=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})$$

は相対粒子の変数しか含まない．H_R の固有ベクトルと H_r の固有ベクトルのテンソル積によってつくられるベクトルが H の固有ベクトルの完全系をつくる．

こうして，表現 $\{\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}\}$ におけるシュレーディンガー方程式は

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\triangle_{\boldsymbol{R}}\right)+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_{\boldsymbol{r}}+V(\boldsymbol{r})\right)\right]\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})=E\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) \tag{44}$$

と書かれる．ここで $\triangle_{\boldsymbol{R}}$ と $\triangle_{\boldsymbol{r}}$ はそれぞれ $\boldsymbol{R}$ と $\boldsymbol{r}$ の座標に関するラプラシアンを表わす(7)．この方程式は

$$\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})=\Phi(\boldsymbol{R})\varphi(\boldsymbol{r})$$

という形の固有解の完全系をもつ．ただし Φ と φ はそれぞれ分離した方程式

$$H_R\Phi(\boldsymbol{R})\equiv\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\triangle_{\boldsymbol{R}}\right)\Phi(\boldsymbol{R})=E_R\Phi(\boldsymbol{R})$$

$$H_r\varphi(\boldsymbol{r})\equiv\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_{\boldsymbol{r}}+V(\boldsymbol{r})\right)\varphi(\boldsymbol{r})=E_r\varphi(\boldsymbol{r})$$

を満たす関数である．系全体の固有エネルギーは部分系の固有エネルギーの和

$$E=E_R+E_r$$

である．

もっと一般に，初期時刻 t_0 において波動関数が二つの因数の積 $F(\boldsymbol{R})f(\boldsymbol{r})$ であったならば，このように因数分解されている性質は時間の経過とともに変わらない．関数 $F(\boldsymbol{R})$ は，質量 M の自由粒子を表わす波束のように変化し，関数 $f(\boldsymbol{r})$ は，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ 内にある質量 m の粒子を表わす波のように変化する(8)．

それゆえ，われわれの出発点であった2体問題の処理は，実際上ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ 内の1粒子の問題に帰着する．ポテンシャルが中心をもつ場合にこの問題を解くことはすでに学んでいる．

---

(7)　この方程式はまた，表現 $\{\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\}$ におけるシュレーディンガー方程式から直接に得られたはずである．そのためにはこの偏微分方程式に変数の変換

$$(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\longrightarrow(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})$$

を施せばよい．

(8)　$m_1\ll m_2$ ならば，$m\simeq m_1$，$M\simeq m_2$ である（例：水素原子，m_1 は電子の質量，m_2 は陽子の質量）．$m_1\simeq m_2$ ならば $m\simeq m_1/2$，$M\simeq 2m_1$（例：重水素核，m_1 は陽子の質量，m_2 は中性子の質量）．

§ 13. 二つより多い粒子系への拡張

相互作用ポテンシャル V が粒子の相対的な位置で決まり，それらの絶対的な位置によらないとき，言いかえれば，すべての粒子の集合の並進に対して相互作用が不変であるときはいつでも，重心運動の分離はきわめて一般に多粒子系に対しても適用される．

実際，ハミルトニアン H が上に述べた不変性をもつような $(N+1)$ 粒子の量子系を考えよう．これらのうちの2粒子に対してその力学変数をそれらの重心と相対粒子の力学変数に置き換えることはつねに可能である．この操作はつづけることができる．すなわち2粒子に対する最初の変換が行なわれたところで，これら2粒子の重心と第3の粒子に対して同じ手続きを行なう．二度つづけてなされた変数変換の結果，三つの粒子は，粒子1と2の《相対粒子》と，粒子3に対する粒子1と2の重心の相対運動に結びつけられた《粒子》と，三つの粒子の重心とに置き換えられる．一般に，N回の変数変換をひきつづき行なうと，$(N+1)$ 個の粒子は N 個の《相対粒子》と $(N+1)$ 個の粒子の集合の重心に置き換えられることになる．全体の重心をこのようにして求める仕方はいろいろある．段階的に一粒子ずつ——$(N+1)!/2$ だけ異なる順序が可能である——進めてもよいし，$(N+1)$ 個の粒子を二つのグループにわけ，各グループがそれぞれ N_1 個，N_2 個の粒子を含むようにし，これら二つのグループの一つ一つに対して重心を求め，それから両グループの重心 $\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2$ を《相対粒子》$\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2$ と全体の重心 $(M_1\boldsymbol{R}_1+M_2\boldsymbol{R}_2)/(M_1+M_2)$ に置き換えてもよい．また $(N+1)$ 個の粒子を三つのグループに分けてもよい．以下同様である．

i 番目の粒子の位置，運動量および質量をそれぞれ $\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}_i, m_i$ で表わし，$(N+1)$ 個の粒子全体の重心に結びついたそれらの量を $\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P}, M$ で表わそう．

$$M=\sum_{i=1}^{N+1} m_i, \qquad \boldsymbol{P}=\sum_{i=1}^{N+1}\boldsymbol{p}_i, \qquad \boldsymbol{R}=\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N+1} m_i\boldsymbol{r}_i.$$

また，上に述べた重心への収縮の各過程で導入される j 番目の《相対粒子》については，対応する量を $\boldsymbol{\rho}_j, \boldsymbol{\varpi}_j, \mu_j$ で表わす $(j=1,2,\cdots,N)$．このような手続きは二つの粒子の重心を求める手続きを N 回繰り返したものであるから，等式 (42) は容易に拡張されてつぎのようになる．

$$m_1m_2\cdots m_{N+1}=M\mu_1\mu_2\cdots\mu_N \tag{45 a}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m_i}=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}+\sum_{j=1}^{N}\frac{\boldsymbol{\varpi}_j^2}{2\mu_j} \tag{45 b}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1} m_i\boldsymbol{r}_i^2=M\boldsymbol{R}^2+\sum_{j=1}^{N}\mu_j\boldsymbol{\rho}_j^2 \tag{45 c}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R}+\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{\varpi}_j\cdot\boldsymbol{\rho}_j \tag{45 d}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{p}_i)=\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P}+\sum_{j=1}^{N}(\boldsymbol{\rho}_j\times\boldsymbol{\varpi}_j). \tag{45 e}$$

他方，同じ理由により，新しい力学変数も $(N+1)$ 粒子の量子系の力学変数に特有の交

換関係にしたがう．最後に，ポテンシャル V が相対座標 $\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2, \cdots, \boldsymbol{\rho}_N$ だけで決まり，全運動エネルギーが重心の運動エネルギー $\boldsymbol{P}^2/2M$ と相対粒子の運動エネルギーの和になること（式（45 b））も明らかであるから，

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + \left[\sum_{j=1}^{N} \frac{\boldsymbol{\varpi}_j^2}{2\mu_j} + V(\boldsymbol{\rho}_1, \cdots, \boldsymbol{\rho}_N)\right].$$

こうしてハミルトニアンは２粒子の場合と同じように分離され，$(N+1)$ 体問題の解決は N 体問題の解決に帰着する．

いま述べた性質はいずれも，重心と相対座標を求めるのに際してどのような手続きを採用するかということに無関係である．特に，導入される N 個の《相対粒子》をどのように選んでも，それらの換算質量の積 $\mu_1\mu_2\cdots\mu_N$，運動エネルギーの和 $\sum_j(\boldsymbol{\varpi}_j^2/2\mu_j)$ および角運動量の和 $\sum_j(\boldsymbol{\rho}_j\times\boldsymbol{\varpi}_j)$ は不変に保たれることになる（式（45 a），（45 b），（45 e））（問題７）．

演 習 と 問 題

1.　（６）で定義されたエルミート動径運動量が等式

$$p_r = \frac{1}{2}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]$$

を満たすことを示せ．

2.　中心力ポテンシャル $V(r)$ 内の１粒子が与えられ，いくつかの束縛状態をもつとする．基底状態は必ず一つの s 状態であることを示せ．もっと一般に，角運動量 L の束縛状態が存在するならば，$l < L$ であるような角運動量 l の各値に対して束縛状態が少なくとも一つ存在することを示せ．また，角運動量 l から得られる最も低いエネルギー準位を E_l で表わせば，必ず

$$E_0 < E_1 < \cdots < E_L$$

となることを示せ．

3.　直交関係と完全性関係を具体的に書くことにより，連続な指数 k $(0 < k < \infty)$ と整の指数 l, m $(l \geqslant 0,\ -l \leqslant m \leqslant l)$ によって定まる自由粒子の固有関数

$$k\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} Y_l^m(\theta, \varphi)\, j_l(kr)$$

が完全直交規格化系をつくることを示せ．

このためには，関数 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \equiv \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$ の極座標による表現が

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = [(r^2\sin\theta)^{-1}\delta(r-r')\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')]$$

であることに注意し，関係式

$$\int_0^\infty j_l(kr)\, j_l(k'r)\, r^2 \mathrm{d}r = \frac{1}{2}\frac{\pi}{k^2}\delta(k-k')$$

を証明する．ベクトル $\boldsymbol{k}$ の極座標を (k, θ_k, φ_k) とするとき，

$$\int \exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, Y_l^m(\theta, \varphi)\, j_l(k'r)\, \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{2\pi^2}{k^2}(-\mathrm{i})^l\, Y_l^m(\theta_k, \varphi_k)\, \delta(k-k')$$

を示せ．

4. 角運動量 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ の単位ベクトル $\boldsymbol{u}$ 方向の成分 $(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{l})$ と，$\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{p}$ の各成分との交換子を計算せよ．結果をまとめた形で書けば，

$$[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{l}),\boldsymbol{p}]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{p}),\qquad [(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{l}),\boldsymbol{r}]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{r})$$

となることを示せ．これから $\boldsymbol{l}$ の各成分がスカラー $\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{r}^2,\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ と交換することを導け．

5. §10 の球形の箱において，束縛 s 状態が存在しないためには，箱を特徴づけるパラメータ V_0 と a はどんな関係を満たさなければならないか．与えられた個数の束縛 s 状態が存在するためにはどうか．また，束縛 s 状態の個数と，エネルギー 0 に対する動径関数の節の個数とのあいだには関係があるか．任意の l に対して同じ問題を考えよ．

6. 中心力ポテンシャル $V(r)$ 内の 1 粒子の動径方程式を WKB 法で取り扱うことにしよう．この方法が正当化されるためには，$V(r)$ が波長程度の領域ですこししか変化しないというばかりでなく，$l\gg 1$ であることも必要である．動径方程式の遠心力による障壁の項 $l(l+1)/r^2$ のなかの $l(l+1)$ を $(l+1/2)^2$ に置き換えても，l の小さい値に対してはこの方法が同じようによい結果を与えることが経験的に認められる——またこのことにはある理論的な裏付けを与えることもできる (Langer, 前掲論文，第 6 章[9] (第 1 巻 193 頁) を参照)．動径方程式をあらかじめこのように変形するとき，どんな l に対しても WKB 法によれば正確につぎのものが与えられることを示せ：

i) 自由球面波 $(V(r)=0)$ の漸近式 $\sin(kr-l\pi/2)/r$；

ii) 水素原子 $(V(r)=-e^2/r)$ のスペクトル；

iii) 等方性調和振動子 $(V(r)=m\omega^2r^2/2)$ のスペクトル (固有値問題 ii), iii) の厳密な解はそれぞれ第11章，第12章に見いだされる)．

7. $(N+1)$ 粒子の量子系に対して重心の分離を二つの異なった手順で行なう．第二の場合に導入された N 個の《相対粒子》の位置ベクトル $\boldsymbol{\rho}'_1,\cdots,\boldsymbol{\rho}'_N$ は，第一の場合に導入された N 個の《相対粒子》の位置ベクトル $\boldsymbol{\rho}_1,\cdots,\boldsymbol{\rho}_N$ から，線形変換

$$\boldsymbol{\rho}'_j=\sum_{k=1}^{N}A_{jk}\boldsymbol{\rho}_k$$

によって導き出される．これらの相対粒子の換算質量を $\mu_1,\cdots,\mu_N$ と $\mu'_1,\cdots,\mu'_N$ とする．このとき

$$U_{jk}=\mu'^{1/2}_j A_{jk}\mu_k^{-1/2}$$

を要素とする $(N\times N)$ 行列は直交行列であることを示せ．

8. 2次元のシュレーディンガー方程式において，ポテンシャル・エネルギー $V(r)$ が動径変数だけで決まる場合を考える $(x=r\cos\theta,\ y=r\sin\theta)$．等式

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

を証明せよ．これから，

$$\psi(r,\theta)=f(r)\exp(\mathrm{i}l\theta)$$

の形の固有関数の完全系が存在することを導け．ただしこの動径部分は方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l^2}{r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))\right]f(r)\equiv 0$$

の解で，原点で0となるものである．

注意；$V(r)=0$ のとき，$k=(2mE)^{1/2}/\hbar$ と置けば，この正則な解はベッセル関数 $J_{|l|}(kr)$ である．

第10章　散乱の問題．中心力ポテンシャルと位相のずれによる方法

§ 1.　序　　説

この章は衝突の問題に関する基本的な概念にあてられる．衝突の実験の結果は断面積という量によって言い表わされる．この量はシュレーディンガー方程式の定常解の漸近的挙動と直接に結びついたものである．断面積の一般的な定義を与えてから，第 I 節の大部分を使ってこの断面積と漸近式との結びつきを明らかにするが，ここで取り扱う簡単な場合は，遠距離で十分速く（$1/r$ より速く）0 に近づくポテンシャルによる 1 粒子の散乱である．それから重心運動を分離する技巧により，相互作用をおよぼしあう 2 粒子の衝突に対してもこの取り扱いがどのようにして拡張されるかを示す．

この章の残りはすべて中心力ポテンシャルによる 1 粒子の散乱と，位相のずれの方法という名で知られた解法とにあてられる．この方法は第 II 節で解説される．これはポテンシャルが有限な作用範囲をもつとき特に便利である．きわめて注目すべき位相のずれの諸性質，とりわけ上記の場合に明らかにしやすい性質が第 III 節で解説され議論される．特に言及しなければならないのは共鳴の現象であり，量子的な衝突を研究するときだけではなく，波の伝播に関する問題ではいつでもこの現象が現われる．共鳴についての議論とその解釈は第 IV 節の主題である．最後の第 V 節では，よく知られた興味のある位相のずれの表わし方がいくつか与えられる．特に二つの近似公式，ボルンの公式とベーテの公式すなわち有効範囲の公式がそれである．

I．断面積と散乱振幅

§ 2.　断面積の定義

典型的な散乱の実験を調べよう．等速度粒子のビームを用意し，これを与えられた標的に当てる．J は入射流束の大きさ，すなわち伝播方向と垂直に置かれ，標的に対して動かない単位面積を，単位時間に通過する入射粒子の個数とする．入射ビームの単位体積あたりの粒子の個数を P とし，標的に対する入射粒子の速さを v とすれば，

$$J = Pv.$$

実験の条件の下では，Pが十分に小さいため，入射粒子のあいだの相互作用を無視することができる．それゆえ粒子は一つ一つ独立に衝突を行なう．適当な計数器を用いて，$\Omega\equiv(\theta,\varphi)$ の方向にある立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 内に単位時間に散乱される粒子の個数 $\mathcal{N}$ を測る．$\mathcal{N}$ は入射流に正比例する：

$$\mathcal{N}=J\Sigma(\Omega)\mathrm{d}\Omega.$$

量 $\Sigma(\Omega)$ は面積の次元をもち，速さ v の1粒子と標的との衝突を特徴づけるパラメータである．これが，上記の標的によるこの粒子の散乱の Ω 方向における断面積である．

実際にはたいていの場合，標的は大きな個数 N の原子または核の散乱体から成り，これらの原子または原子核の相互の距離は入射粒子の波長にくらべて十分大きく，その結果各散乱体による散乱波のあいだの干渉はすべて無視することができる(1)．このとき各散乱中心は孤立しているように作用する．さらに，標的が十分に薄くて多重散乱が無視されるとき，$\mathcal{N}$ は N に正比例し，

$$\mathcal{N}=JN\sigma(\Omega)\mathrm{d}\Omega$$

となる．面積 $\sigma(\Omega)$ は上記の散乱中心によるこの粒子の散乱の Ω 方向における断面積，あるいはもっと簡潔に散乱の微分断面積と名づけられる．

単位時間に散乱される粒子の総数を得るためには，角について積分すればよい．それは $JN\sigma_{\mathrm{tot.}}$ に等しく，

$$\sigma_{\mathrm{tot.}}=\int\sigma(\Omega)\mathrm{d}\Omega$$

は散乱の全断面積である．

散乱中心が 10^{-13} cm から 10^{-12} cm の1次元の大きさをもつような核物理学では，断面積をふつうバーン (barn) またはミリバーン (mb) で測る：

$$1\ \mathrm{barn}=10^{-24}\ \mathrm{cm}^2,\qquad 1\ \mathrm{mb}=10^{-27}\ \mathrm{cm}^2.$$

これまでのところ，われわれが暗黙のうちに仮定しているのは，起こりうる衝突が弾性的な散乱だけであること，すなわち衝突のあいだに散乱体の量子的状態は変化を受けず，散乱体の内部自由度へのエネルギーの移行はなおさらありえないということである．われわれはしばらくこの型の衝突に制限しておく．さらにまた，原子や核のような散乱体を複雑な形で取り扱う代りに，粒子の位置座標 $\boldsymbol{r}$ によって決まる静的なポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ によってそれらを表わす．

---

(1) この状況がいつでも実現するわけではない．この規則に対するいくつかの重要な例外は結晶中の回折現象，電子または熱中性子またはX線の回折である．

§3. 定常散乱波

そこで質量 m の粒子のポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ による散乱を考えよう．この章では，$r \to \infty$ のとき $1/r$ より速く 0 に近づくポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ に限定する．クーロン・ポテンシャルによる散乱は第11章で取り扱われよう．

粒子のエネルギーを E とし，初めの運動量を $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ とする．シュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right]\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=E\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$$

を満たし，無限遠での挙動が

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+f(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{1}$$

の形をとる解に断面積 $\sigma(\Omega)$ を結びつけることができる．$\boldsymbol{k}$ のおのおのの値に対して，この型の解がただ一つだけ存在することは証明なしに認めておく(2)．この解 $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ を，波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の**定常散乱波**と名づける．

流れの密度ベクトル(3)の定義（第4章の（9））

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r})=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}[\psi^*(\boldsymbol{r})(\nabla\psi(\boldsymbol{r}))-(\nabla\psi(\boldsymbol{r}))^*\psi(\boldsymbol{r})]$$

を参照すれば，漸近式の二つの項は容易に解釈される．平面波の項 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ は密度1の波動を表わし，その流れの密度は $\hbar\boldsymbol{k}/m$ である．$f(\Omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}/r$ の項は，$1/r$ に関して最低位の部分だけをとれば，密度 $|f(\Omega)|^2/r^2$ の波動を表わし，その流れの密度は Ω 方向に沿って r の増す向き（出てゆく波）を向いており，その大きさは $(\hbar k/m)(|f(\Omega)|^2/r^2)$ に等しい．さらに，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ の影響は漸近的区域では無視されるから，古典的近似（第6章§4を参照）によれば，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ の項は等速度粒子のビームと解釈され，その運動量は $\hbar\boldsymbol{k}$，密度は1であり，入射ビームを表わす．$f(\Omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}/r$ の項は散乱中心から放射状に放出される粒子束と解釈され，散乱された粒子のビームを表わす．

この解釈にしたがって，Ω 方向にある立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 内に放出される粒子の単位時間あたりの個数を計算することができる．そのためには，きわめて大きな半径の球面を考え，立体角 $\mathrm{d}\Omega$ によって切り取られる微小部分を通過する散乱粒子の流束を求めればよい．これは

---

(2) V が原点で強い特異性をもたない中心力ポテンシャルであるような特殊の場合については，このことを第II節で証明する．

(3) 点 $\boldsymbol{r}_0$ における流れを表わすエルミート演算子 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}_0)$ をつぎのように定義することができる：

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}_0)=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)+\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{p}).$$

さきに定義した流れは，ある決まった量子的状態に関するこの演算子の平均値である．

$(\hbar k/m)|f(\Omega)|^2 \mathrm{d}\Omega$ である．これを入射流束 $J=\hbar k/m$ で割れば，散乱の断面積

$$\boxed{\sigma(\Omega)=|f(\Omega)|^2} \tag{2}$$

が得られる．$f(\Omega)$ は**散乱振幅**と呼ばれる．

§ 4.　波束のビームによる散乱現象の表現(4)

上に述べたごく直観的な説明は，つぎの二つの理由により不正確である．

第一に，流れの密度ベクトルは単に入射平面波と散乱波の流れの和ではない．これら二つによる部分のほかに，$\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ と $f(\Omega)[\exp(\mathrm{i}kr)/r]$ のあいだの干渉による項を付け加える必要がある．上記の説明では入射波と散乱波の干渉が故意に無視されている．

第二に，定常散乱波

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar} \tag{3}$$

による物理的状況の表現は一つの理想化である．現実には，散乱に加わる各粒子は一つの波束によって表わされ，それは大きさにおいても方向においても $\boldsymbol{k}$ とすこし違った波数ベクトルに対応する（３）型の定常波を重ね合わせてつくられるはずのものである．この波束は初期条件を正確に満たすようにつくられる．運動量の方向に散らばりがあるために，進行に垂直な方向（横方向）では，入射ビームをつくった装置の絞りの幅を越えないように波束の幅が制限される．エネルギーに散らばりがあるために，波束は縦方向の長さにも限定を受け，標的の方向に直線軌道に沿って群速度 $\boldsymbol{v}=\hbar\boldsymbol{k}/m$ に等しい速度で伝播することになる(*)．

この軌道を指定するために，散乱中心を通り伝播方向に垂直な平面（S）と軌道との交点の位置 $\boldsymbol{b}$ を使うのが便利である．波束の運動がポテンシャルの存在によって影響を受けないと仮定したとき波束の中心が平面（S）を横切る時刻を t_0 とすれば，衝突前の波束の中心の運動は

$$\langle\boldsymbol{r}\rangle=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{v}(t-t_0) \qquad (t\ll t_0)$$

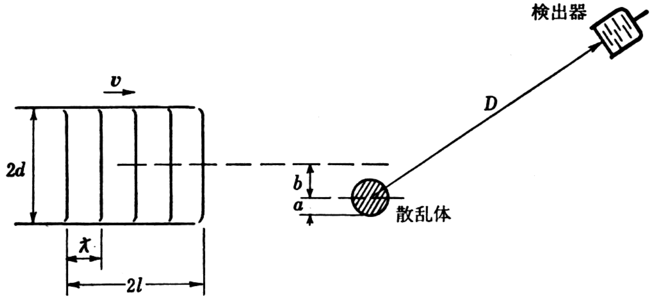
という法則にしたがう．

入射ビームは実際上この型の波束のビームである．これらの波束は互いに平行に速度 $\boldsymbol{v}$ で移動し，パラメータ $\boldsymbol{b}$ と t_0 の値を異にするだけであり，衝突前の各中心の運動はこれらの値によって定められる．

---

(4)　§4, 5, 6 に述べる散乱問題の取り扱いの本質的な部分は，散乱の理論に関するチューとローの解説による．§16 の計算もまたこれらの解説書から借りたものである．

(*)［訳注］　進行方向を x 方向とすると，波束に幅があるということは Δy と Δz が有限だということであるから，不確定性原理から，Δp_y と Δp_z が 0 でなくなり，$\boldsymbol{p}$ の方向が完全に x 方向ではなくて散らばりがあることになる．進行方向（縦方向）の長さ Δx が有限ということは，$\Delta p_x \neq 0$ つまり $\boldsymbol{p}$ の大きさに不確定さがあるということであるから，その関数としてのエネルギーに散らばりがあるということに対応する．ここの書き方は，原因と結果の関係が逆のような感じで，ちょっとわかりにくい．



10・1 図 散乱実験の概念図とこの現象に入ってくる特有の長さ

以下の議論ではつぎのような特有の長さが関係してくる（10・1 図）：

$\lambda\!\!\!^{-} = (\hbar/mv)$ = 入射波束の平均波長
d, l = 入射波束の横断面方向，縦方向の大きさ
a = 散乱領域のひろがり
D = 散乱区域から計数装置までの距離.

不確定性関係の働きによって，d と l はそれぞれ入射波束の方向とエネルギーの散らばりに結びつけられる．われわれは入射の伝播方向とエネルギーが十分に定まることを仮定しているから，

$$\lambda\!\!\!^{-} \ll d \quad と \quad \lambda\!\!\!^{-} \ll l \tag{4}$$

が成り立つ．衝突の現象が波束の特殊な形によって決定的な影響を受けないためには，さらにこれらの大きさが散乱領域，すなわち 0 でないポテンシャルが支配する空間領域の大きさよりもずっと大きいことが必要である．すなわち

$$a \ll d, l \tag{5}$$

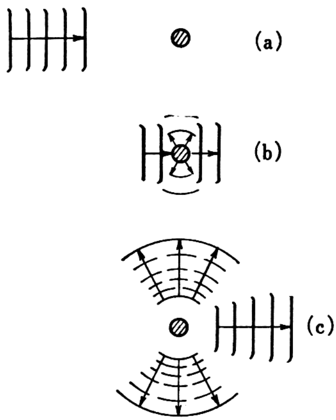
（散乱体が原子であるときは $a \simeq 10^{-8}$ cm；原子核のときは $a \simeq 10^{-12}$ cm).

これらを仮定した上で，衝突パラメータが波束の横方向の大きさより大きい ($b > d$) とき，入射波束はけっして散乱領域に達せず，ずっと自由波束として伝播する．反対に $b < d$ ならば，ある時刻 $t_1 \simeq t_0-(l/v)$ に散乱領域に達する．本来の意味の衝突はこの瞬間に始まる．十分長い時間ののちに，この波束は全体としてふたたび散乱領域の外へ出る．このとき一般に波束は二つの項の和になる．一つは透過波束であって，その形も伝播の法則もおおよそ入射波束のものと同じである．もう一つは散乱波束であって，入射方向と異なる方向をもつ[5]（10・2 図).

散乱された粒子の探知を行なうためには，散乱中心からの方向が与えられた $\Omega = (\theta, \varphi)$ で距離が D 程度のところに適当な計数システム（計数器，写真乾板など）を配置す

---

[5] この現象は第 3 章（§3, 6, 7）で学んだ 1 次元波の反射と透過の現象に似ている.



10·2図 波束の散乱現象の経過. (a) 衝突前, (b) 衝突中, (c) 衝突後（斜線は0でないポテンシャルが支配する領域).

る. 波束の拡散を実験のあいだ中無視できる範囲にとどめたいならば, 距離Dをあまり大きくしてはならない（第6章§3を参照). すなわち

$$\sqrt{\lambda\!\!\!^{-} D} \ll d, l. \tag{6}$$

この制限の下に, 探知は十分遠くで行ない, 探知される波の伝播が散乱中心の存在によって影響を受けないようにしなければならない. すなわち

$$a, \lambda\!\!\!^{-} \ll D. \tag{7}$$

また, 探知器がけっして透過波を受けないようにしなければならない. それには

$$d \ll D \sin\theta \tag{8}$$

が必要である（注意；正面の散乱波 ($\theta = 0$) はどうしても透過波と分離できない).

条件（4)—(8）を総合して, 最終的にはつぎの不等式が得られる[6].

$$a, \sqrt{\lambda\!\!\!^{-} D} \ll l \tag{9 a}$$

$$a, \sqrt{\lambda\!\!\!^{-} D} \ll d \ll D. \tag{9 b}$$

断面積 $\sigma(\Omega)$ が実際に（2）によって与えられるためには, この大きさを測る装置が条件（9）を満たすことが必要である.

さらにまた, 波束に対してはっきり決まった散乱振幅を与えうるために十分な精度で波束の方向とエネルギーが定められていなければならない. エネルギーと入射角がこれらの平均値の前後でそれぞれ $\delta E \simeq \hbar v/l, \lambda\!\!\!^{-}/d$ 程度の量だけ変わるとき, $f(\Omega)$ は絶対値においても偏角においても事実上一定でなければならない.

この結果の証明がつぎの§5, §6の主題である.

§5. ポテンシャルによる波束の散乱

このような状況 ($l, d \gg a$) において, 入射ビームの波束の変化は事実上その特殊な形に無関係である. われわれはこれらがすべて同じ形であり, その一つ一つは中心の運動を定めるパラメータ $\boldsymbol{b}, t_0$ によって特徴づけられると仮定する. t_0 を時刻の原点にとろう ($t_0 = 0$). 得られる結果の一般性はこれによって失われない.

入射波束の形を定めるために, ノルム1の関数 $\chi(\boldsymbol{\rho})$ を導入する.

---

(6) 原子物理学あるいは核物理学において, d は最大限入射粒子の入口の絞りの幅に等しく, $d \simeq 1\,\mathrm{mm}$. l はそれよりずっと大きくすることができる. Dは1m程度である. $a \simeq 10^{-8}\,\mathrm{cm}$, $\lambda\!\!\!^{-} \simeq 10^{-8}\,\mathrm{cm}$ というのが最大のところであるが, これによると $\sqrt{\lambda\!\!\!^{-} D} \simeq 10^{-3}\,\mathrm{cm}$, $l/a \gtrsim d/a \simeq 10^7$, $l/\sqrt{\lambda\!\!\!^{-} D} \gtrsim d/\sqrt{\lambda\!\!\!^{-} D} \simeq 10^2$, $d/D \simeq 10^{-3}$. 条件（9）はそれゆえ十分に満たされる.

$$\int |\chi(\boldsymbol{\rho})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{\rho} = 1. \tag{10}$$

このフーリエ変換を $A(\boldsymbol{\kappa})$ で表わし，

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) = \int A(\boldsymbol{\kappa}) \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\rho}) \mathrm{d}\boldsymbol{\kappa} \tag{11}$$

となるように規格化しておく．$\chi(\boldsymbol{\rho})$ は実関数であり，$\boldsymbol{\rho}=0$ を中心として縦方向に l，横方向に d の幅をとった領域のなかでだけ顕著な値をとると仮定する．同様に $A(\boldsymbol{\kappa})$ も実で，$\boldsymbol{\kappa}=0$ を中心として縦方向に $(1/l)$，横断方向に $(1/d)$ の幅をとった領域でだけ顕著な値をとる．議論を簡単にするため，$d \simeq l$ と仮定する．

衝突のずっと前 $(t \ll -l/v)$ には，われわれが調べようとする波束 $\Psi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},t)$ を自由波束 $\Phi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},t)$ と同一視しなければならない．$\Phi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},t)$ の中心は法則

$$\langle \boldsymbol{r} \rangle = \boldsymbol{b} + \boldsymbol{v}t$$

にしたがって移動し，時刻 $t=0$ における形は

$$\Phi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{b})}\chi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{b}) = \int A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{b})}\mathrm{d}\boldsymbol{k}'$$

によって与えられる．さらに

$$\Phi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},t) = \int A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{b})-(E't/\hbar)]}\mathrm{d}\boldsymbol{k}'. \tag{12}$$

波束の形が変わることを無視すれば，この自由波束はまた

$$\Phi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},t) \simeq \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-(Et/\hbar)]}\chi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t-\boldsymbol{b}) \tag{13}$$

という式によっても表わされる（第8章§18を参照）．この式を得るには，(12) の右辺の積分において，エネルギー $E' = \hbar^2 k'^2/2m$ を，$\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}$ に関するべき級数展開の最初の2項で置き換え，

$$E' = E + \hbar\boldsymbol{v}\cdot(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$$

とすればよい．

波束 $\Psi_{\boldsymbol{b}}$ は，積分 (12) のなかの平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}$ のところに定常散乱波 $\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})$ を代入して得られる．すなわち

$$\Psi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},t) \simeq \int A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{b}}\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E't/\hbar}\mathrm{d}\boldsymbol{k}'. \tag{14}$$

実際，これはシュレーディンガー方程式の解の重ね合わせであるから，確かに解の一つである．それゆえ，衝突の起こる前にはこれが自由波束 $\Phi_{\boldsymbol{b}}$ と同じであることを示せばよい．

関数 $A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$ は点 $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}$ の近くでだけいちじるしいピークをもつから，積分 (14) に対する主要な寄与はこの点を囲む領域だけからくる．$t \ll -l/v$ のとき，被積分関数の位相は，指数関数 $\exp(\mathrm{i}E't/\hbar)$ があるために，一般にはこの領域できわめて速く変化し，積分は事実上0になるが，$\boldsymbol{r}$ の値がこの位相に停留値を与えるところは別である．そのことが起こるのは r が $v|t|$ 程度のところだけであり，言いかえれば，$\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})$ をその漸近式

$$\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} + f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'r}}{r} \tag{15}$$

で置き換えられるような配置空間の領域だけである．この式を積分 (14) に代入すれば，

$$\Psi_b(\boldsymbol{r},t) \underset{t\to-\infty}{\sim} \Phi_b(\boldsymbol{r},t)+\Psi_b^{(d)}(\boldsymbol{r},t), \tag{16}$$

ただし

$$\Psi_b^{(d)} = \int A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{b}} f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k'r-(E't/\hbar)]}}{r}\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}' \tag{17}$$

となる．$t\to-\infty$ のとき，(17) の右辺の被積分関数の位相は領域 $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}$ においてけっして停留値をとらず，積分 $\Psi_b^{(d)}$ はどんな r に対しても事実上0になる．したがって波束 Ψ_b はこの極限において自由波束と確かに一致する．

今度は探知区域における波束 Ψ_b の変化を調べよう ($r \gtrsim D$)．この空間領域では $\phi_{\boldsymbol{k}'}$ をその漸近式 (15) で置き換えることが確かに許される．それゆえ (16) がふたたび成り立つ．

われわれは点 $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}$ のまわりの幅 $1/d \simeq 1/l$ をもった領域において，方向とエネルギーの散らばりが十分に小さく，$|f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega)|$ は事実上一定であると仮定し，積分 (17) のなかの $f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega)$ の絶対値は点 $\boldsymbol{k}$ における値に換え，その偏角は展開式の最初の2項に換えることができるとする．すなわち

$$\begin{aligned} \arg f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega) &\simeq \arg f_{\boldsymbol{k}}(\Omega)+(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{s}(\Omega) \\ \boldsymbol{s}(\Omega) &= \mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}[\arg f_{\boldsymbol{k}}(\Omega)] \qquad (s \ll d, l). \end{aligned} \tag{18}$$

同じように，他の項の偏角も展開式の最初の2項に置き換える：

$$k' \simeq k+\boldsymbol{u}\cdot(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}), \qquad E' \simeq E+\hbar\boldsymbol{v}\cdot(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}) \tag{19}$$

($\boldsymbol{u}\equiv\boldsymbol{v}/v=$ 入射方向の単位ベクトル)．Φ_b に関して行なったのと同じような考察を位相の停留値について行なえば ((13) を参照)，式

$$\Psi_b^{(d)} \simeq \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}} f_{\boldsymbol{k}}(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kr-(Et/\hbar)]}}{r}\chi[\boldsymbol{u}(r-vt)+\boldsymbol{s}-\boldsymbol{b}] \tag{20}$$

が得られる．

$\Psi_b^{(d)}$ のもつ重要さは，衝突パラメータ b が d より大きいか小さいかで異なる．

$b>d$ ならば，任意の時刻と任意の r に対して，χ の変数〔$\boldsymbol{u}(r-vt)+\boldsymbol{s}-\boldsymbol{b}$〕は χ の値が無視される範囲にある．すなわち $\Psi_b^{(d)}$ は事実上つねに0であり，波束は自由波束のように伝わる．

$b<d$ ならば，すなわち入射波束が伝播の途中で実際に散乱区域に達するならば，球面 $r=vt$ の両面に l 程度の厚みをつけた球殻のなかで χ は無視できない値をとる．衝突前には事実上0であった $\Psi_b^{(d)}$ が衝突後には速さ v で出てゆく波束，すなわち動径方向の速さ v で散乱体から遠ざかってゆく球面波束を表わす．時刻 $t\simeq D/v$ に波動 $\Psi_b^{(d)}$ は探知の領域に達する．このとき，正面の方向 ($\theta<d/D$) では $\Psi_b^{(d)}$ と透過波 Φ_b がどちらも無視されず，互いに干渉しうる[7]が，その方向を除けば $\Psi_b^{(d)}$ は Φ_b から完全に分離される．こうしてわれわれは§4で述べた定性的な結果にもう一度到達した．

---

(7) この干渉の項は確かに無視できない．これによってノルムの保存が保証されるからである（問題1）．

§ 6.　断面積の計算

断面積を計算する前に，探知の操作がどういうものであるかをはっきりさせておこう．どのような実験上の手筈を用いるにせよ，それは本質的には標的に関して $\Omega=(\theta,\varphi)$ の方向で距離 D のところに一つの絞りを置くことと同じである．この絞りの窓は，一定の立体角 $(\Omega,\Omega+\delta\Omega)$ のなかに放出されるすべての波を崩さずに通過させ，他の波をさえぎるように配置される．絞りのうしろに置かれた探知のシステムは，一つの粒子が絞りを横ぎるごとに作動する．探知前の運動が波動 $\Psi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r},t)$ によって表わされる一つの粒子により，探知器が作動する確率 $P_{\boldsymbol{b}}(\Omega)\delta\Omega$ は，絞りを横ぎるこの波の流束を衝突のつづく期間(8)の全体にわたって積分したものに等しい．あるいは同じことであるが，衝突が終ったとき $(t=T\gg l/v)$ 立体角 $(\Omega,\Omega+\delta\Omega)$ のなかにこの散乱粒子がある確率に等しい．

探知器は横断方向から十分離れて置かれ，透過波はけっして到達できない（条件（8））から，存在確率の計算には散乱波 $\Psi_{\boldsymbol{b}}^{(d)}$ だけが入ってくる．その式 (20) から，

$$
\begin{aligned}
P_{\boldsymbol{b}}(\Omega) &= \int_0^\infty |\Psi_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(\boldsymbol{r},T)|^2 r^2 \mathrm{d}r \\
&= |f_{\boldsymbol{k}}(\Omega)|^2 \int_0^\infty |\chi(\boldsymbol{u}(r-vT)+\boldsymbol{s}-\boldsymbol{b})|^2 \mathrm{d}r
\end{aligned}
\tag{21}
$$

となる．$vT\gg l$ であるから，変数変換

$$z=r-vT$$

を行ない，積分の下端を $-\infty$ にまでひろげることができ，その結果は

$$P_{\boldsymbol{b}}(\Omega) = |f_{\boldsymbol{k}}(\Omega)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(\boldsymbol{u}z+\boldsymbol{s}-\boldsymbol{b})|^2 \mathrm{d}z.$$

いま，流束 1 の粒子ビームを考えよう．単位時間に面積要素 $(\boldsymbol{b},\boldsymbol{b}+\mathrm{d}\boldsymbol{b})$ に向かう入射粒子は $\mathrm{d}\boldsymbol{b}$ 個あり，その一つ一つが $(\Omega,\Omega+\delta\Omega)$ 方向に散乱される確率は $P_{\boldsymbol{b}}(\Omega)\delta\Omega$ である．単位時間と単位流束に対する $(\Omega,\Omega+\delta\Omega)$ 方向への散乱の確率を得るには，上の式を $\boldsymbol{b}$ について積分すればよい．すなわち

$$\sigma(\Omega) = |f_{\boldsymbol{k}}(\Omega)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}z \int \mathrm{d}\boldsymbol{b}\, |\chi(\boldsymbol{u}z+\boldsymbol{s}-\boldsymbol{b})|^2.$$

$\boldsymbol{b}$ についての積分範囲は $\boldsymbol{u}$ に垂直な平面である．変数変換 $\boldsymbol{\rho}=\boldsymbol{u}z+\boldsymbol{s}-\boldsymbol{b}$ を行なえば，この三重積分は関数 χ の規格化積分（式 (10)）に帰着する．こうして関係式（2），すなわち

$$\sigma(\Omega) = |f_{\boldsymbol{k}}(\Omega)|^2$$

がうまくもう一度見いだされた．

---

(8)　この粒子が絞りを横ぎる時刻は平均すると $[D+(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{s})]/v$ に等しい．また時間-エネルギー不確定性関係によれば，この時刻を l/v 以上の精度で予想することはできない．$(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{s})/v$ は散乱波の伝播における遅れと解釈される．実際には，ここで考えている実験の配置によると，$s\ll l$ であるから，このような遅れを観測することは確かにできない（反射の遅れに関する第 3 章 § 6 の議論を参照）．この種の遅れを観測するには，エネルギーの決定を十分に悪くすることを前提とする（§ 16 を参照）．

§ 7.　2粒子の衝突．実験室系と重心系

重心分離の技巧によって，ポテンシャル内の1粒子の散乱の取り扱い方は，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ にしたがう2粒子の衝突にも拡張される．ただし $V(\boldsymbol{r})$ はこれら2粒子の相対的な位置だけで決まるものとする．第9章第Ⅲ節で示したように——あの節の記号をここでも使うことにして——2粒子の運動は二つの運動に分解される．一つは重心の運動で，これは自由粒子のように変化する．もう一つは《相対粒子》の運動で，これは質量 $m = m_1 m_2/(m_1+m_2)$ をもち，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ に支配される．

典型的な散乱の実験においては，2型の粒子群から成る標的に，1型の粒子群から成る等速のビームを当て，どちらかの型の粒子，たとえば粒子1が与えられた方向 $\Omega_1 = (\theta_1, \varphi_1)$ に何個放出されるかを数える．衝突前には，粒子2は静止しており，粒子1はある速度 $\boldsymbol{v}$ で動くから，重心は速度

$$\boldsymbol{V} = \frac{m_1}{M}\boldsymbol{v} \qquad (M = m_1+m_2)$$

で移動する．系の全エネルギーは重心運動のエネルギーと相対運動のエネルギーとの和

$$E = E_R + E_r$$

$$\left(E = \frac{1}{2}m_1 v^2\,;\; E_R = \frac{1}{2}MV^2 = \frac{m_1}{m_1+m_2}E\,;\; E_r = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{m_2}{m_1+m_2}E\right)$$

である．衝突の期間を通じて，重心は一様な直線運動をつづけ，衝突の現象は相対座標にしか影響しない．散乱の断面積 $\sigma_1(\Omega)$ が相対座標のエネルギー E_r に対する定常状態の漸近的な挙動に結びついていることは明らかである．

この関係を見いだすためには，座標系を変換して，新しい座標系に対しては重心が静止しているようにし，この系によって同じ現象を調べるとつごうがよい．ふつう，標的粒子が静止しているような座標系を**実験室系**と呼び，重心が静止しているような座標系を**重心系**と呼ぶ．前者はこれまでに見てきたものであり，後者はそれに対して動いており，速度 $\boldsymbol{V}$ の一様な平行移動を行なう．座標系を変えることによって影響を受けるのは重心の運動だけである．相対粒子の運動は変わらない．

§2で断面積の定義を与えたとき，標的が初めに静止しているということはまったく仮定されていない．この定義に入ってくる入射流束は散乱体に対する入射体の相対流束であることに留意しよう．この量はどの座標系を採用するかに無関係である．このことを明確にしておけば，実験室系に関する微分断面積 $\sigma_1(\Omega)$ を定めるのと同様にして，同じ過程の重心系に関する微分断面積 $\sigma(\Omega)$ を定めることができる．すべての観測が重心系に関して行なわれ，放射角もこの系に関して測られるとして，単位の相対流束をもつ粒子1の入射ビームを粒子2に当てるとき，Ω 方向の単位立体角に単位時間に放射される粒子1の個数が $\sigma(\Omega)$ である．

この定義から

$$\sigma(\Omega)\,\mathrm{d}\Omega = \sigma_1(\Omega_1)\,\mathrm{d}\Omega_1 \tag{22}$$

が出てくる．この式において，粒子1が重心系に関して Ω 方向に伝わるとき，Ω_1 は実験室系に関するこの粒子の放射方向を表わす．全断面積は等しい，すなわち

$$\sigma_{\mathrm{tot.}} \equiv \int \sigma(\Omega)\,\mathrm{d}\Omega = \sigma_{1\,\mathrm{tot.}}$$

であることに注意しよう．このことはまた本来明らかである．なぜなら全断面積は単位入射流束に対する散乱粒子の総数であって，座標変換に関する不変量であるからである．

$\sigma(\Omega)$ は $\sigma_1(\Omega_1)$ よりもいっそう直接に，ポテンシャル $V(r)$ による相対粒子の（3次元の）散乱問題に結びつけられる．実際，重心系においては粒子1の伝播方向と相対粒子の伝播方向とが一致する（粒子2は反対の向きに伝わる）．さらに，力の中心（$r=0$）に対する相対粒子の入射流束がわれわれの衝突問題における入射流束に等しいから，$\sigma(\Omega)$ は Ω 方向における相対粒子の散乱の断面積，すなわち質量 m と初速 v をもつ粒子がポテンシャル $V(r)$ によって受ける散乱の Ω 方向における微分断面積である．

特に，$V(r)$ が漸近的に $1/r$ より速く0に近づくときには，すでに知られたように，相対粒子のシュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E_r\psi(\boldsymbol{r})$$

はエネルギー E_r の固有解をもち，その漸近的挙動は

$$\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + f(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}$$

（$E_r = \hbar^2k^2/2m$，$\boldsymbol{k} = m\boldsymbol{v}/\hbar = m_2\boldsymbol{k}_1/M$，$\boldsymbol{k}_1$ は実験室系における入射波数ベクトル）であり，また

$$\sigma(\Omega) = |f(\Omega)|^2$$

が得られる．

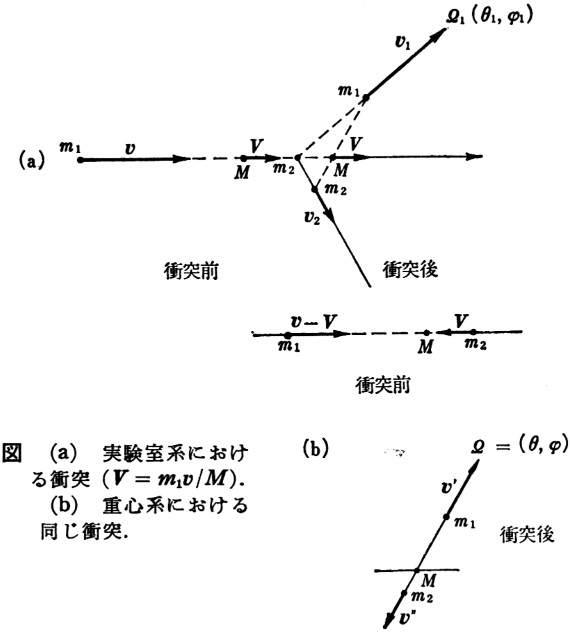
この式[9]から実験室系における断面積 $\sigma_1(\Omega_1)$ の式に移るためには，Ω と Ω_1 とのあいだの関係をつけることが残されている．これら二つの系の極軸の方向を伝播方向と平行な向きにとろう．10•3図 (a) は実験室系における衝突の概念図を示し，10•3図 (b) は重心系における同じ衝突の図である．これら二つの粒子の初めと終りの速度は極座標を用い

---

(9) ここで行なった計算はすべて非相対論的近似においてしか成り立たない．それにもかかわらず，重心系の概念は相対論的力学においても成り立つ．それは全運動量（粒子1の運動量＋粒子2の運動量）が0となるような座標系である．重心系から実験室系へはローレンツ変換によって移る．ここで取り扱った非相対論的近似においては，このローレンツ変換が一つのガリレイ変換すなわち

$$\boldsymbol{r}_i \longrightarrow \boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{V}t, \qquad \boldsymbol{p}_i \longrightarrow \boldsymbol{p}_i + m_i\boldsymbol{V}$$

に帰着する．



10・3図　(a)　実験室系における衝突 ($\boldsymbol{V} = m_1\boldsymbol{v}/M$).
(b)　重心系における同じ衝突.

てつぎの表のように与えられる.

	初めの速度		終りの速度	
	1	2	1	2
実験室系	$\boldsymbol{v}(v, 0, 0)$	0	$\boldsymbol{v}_1(v_1, \theta_1, \varphi_1)$	$\boldsymbol{v}_2(v_2, \theta_2, \varphi_2)$
重心系	$\boldsymbol{v}-\boldsymbol{V}(v-V, 0, 0)$	$-\boldsymbol{V}(V, \pi, 0)$	$\boldsymbol{v}'(v', \theta, \varphi)$	$\boldsymbol{v}''(v'', \pi-\theta, \varphi+\pi)$

$$V = \frac{m_1}{m_1+m_2}v, \quad v' = v-V = \frac{m_2}{m_1+m_2}v, \quad v'' = V = \frac{m_1}{m_1+m_2}v.$$

(θ_1, φ_1) を (θ, φ) の関数として定めるには，ベクトル間の等式[10]

$$\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}'+\boldsymbol{V} \tag{23}$$

すなわち

$$\varphi_1 = \varphi, \quad v_1\sin\theta_1 = v'\sin\theta, \quad v_1\cos\theta_1 = v'\cos\theta+V$$

を使う．これから

[10] 同様に，等式 $\boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{v}''+\boldsymbol{V}$ を使えば，(θ_2, φ_2) と (θ, φ) とのあいだの関係が得られる．$v'' = V$ であるから，$\theta_2 = (\pi-\theta)/2$，$\varphi_2 = \varphi+\pi$ が容易に示される．

$$\tan\theta_1 = \frac{\sin\theta}{\cos\theta+\tau},$$

すなわち

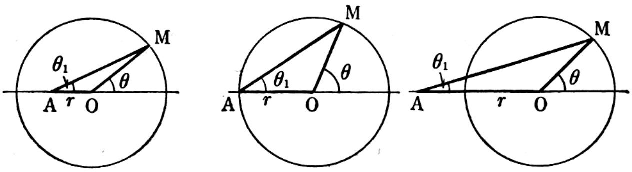
$$\cos\theta_1 = \frac{\cos\theta+\tau}{(1+2\tau\cos\theta+\tau^2)^{1/2}}. \tag{24}$$

これらの式のなかでわれわれは

$$\tau = \frac{V}{v'} = \frac{m_1}{m_2} \tag{25}$$

と置いた．

ベクトルの和 (23) はまた作図によっても求められる．関係式 (24) は図から直接に読みとられ，結果に関する議論は式 (24) そのものよりも図について行なうほうがやさしい．作図による θ_1 の求め方は 10•4 図に示される．ここでつぎの二つの場合が起こる．



10•4 図　θ_1 を θ の関数として作図すること：
$\mathrm{OA} = \tau$, $\mathrm{OM} = 1$ $(\tau = V/v' = m_1/m_2)$.

i)　$\tau < 1$ $(m_1 < m_2)$.

θ が 0 から π まで増すとき角 θ_1 は 0 から π まで単調に増加する．どのような θ に対しても $\theta/2 < \theta_1 < \theta$ であることに注意しよう．$m_1 \ll m_2$ となる極限では $\theta_1 \simeq \theta$ が得られる（衝突の行なわれるあいだ重心は実際上粒子 2 と一致し，したがって実験室系に対して動かない）．

ii)　$\tau > 1$ $(m_1 > m_2)$.

θ が 0 から π まで増すとき，初めのうち θ_1 は 0 から増加してある最大値に達する．この値は $\pi/2$ より小さく，$\theta_{1\,\mathrm{max.}} = \sin^{-1}(1/\tau)$ である．その後は $\theta_{1\,\mathrm{max.}}$ から 0 まで減少する．それゆえ θ_1 の一つ一つの値に θ のとりうる値が二つ対応する．これを $\theta_<, \theta_>$ とすれば $\theta_1 = (\theta_< + \theta_> - \pi)/2$ という関係で結ばれる．これらの一つ一つに v_1 の異なる二つの値が対応し，θ の小さい方の値に v_1 の大きい方が対応する．

($\tau = 1$ $(m_1 = m_2)$ のときは単に $\theta_1 = \theta/2$ となる)．

関係式 (24) から

$$\frac{\mathrm{d}(\cos\theta_1)}{\mathrm{d}(\cos\theta)} = \frac{1+\tau\cos\theta}{(1+2\tau\cos\theta+\tau^2)^{3/2}}$$

が導かれ，

$$\frac{d\Omega_1}{d\Omega} = \left|\frac{d(\cos\theta_1)}{d(\cos\theta)}\right|$$

であるから，関係式 (22) を使って

$$\sigma_1(\Omega_1) = \sigma(\Omega)\frac{d\Omega}{d\Omega_1} = \frac{(1+2\tau\cos\theta+\tau^2)^{3/2}}{|1+\tau\cos\theta|}|f(\Omega)|^2 \tag{26}$$

が得られる．

II．中心力ポテンシャルによる散乱．位相のずれ

§ 8.　部分波への分解．位相のずれによる方法

中心力ポテンシャル $V(r)$ による 1 粒子の散乱を考えよう．断面積を計算するためには，定常散乱波 ψ の漸近式を決める必要がある．そのためにシュレーディンガー方程式を球面座標について解いてみる．

この問題については入射波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の方向が回転対称軸になっている．これを極軸にとれば，波動 ψ と散乱振幅 f は φ に無関係である．これらをルジャンドルの多項式によって級数に展開すれば，

$$\psi(r,\theta) = \sum_l \frac{y_l(r)}{r} P_l(\cos\theta) \tag{27}$$

$$f(\theta) = \sum_l f_l P_l(\cos\theta) \tag{28}$$

となる．

$$\varepsilon = k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E, \qquad U(r) = \frac{2m}{\hbar^2}V(r)$$

と置こう．y_l は動径方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\left(\varepsilon-U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\right]y_l = 0 \tag{29}$$

の正則な解である．それは漸近式

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} a_l \sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l\right) \tag{30}$$

をもつ．動径方程式を与えれば位相のずれ δ_l は一意的に定められる．定数 a_l は，$\psi(r,\theta)$ が望みどおりの漸近的挙動を示すように調整しなければならない．展開式（第 9 章 (35)）と (28) を使えば，ψ の漸近式をルジャンドルの多項式による級数の形

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} = \sum_l\left((2l+1)i^l j_l(kr)+f_l\frac{e^{ikr}}{r}\right)P_l(\cos\theta)$$

に書くことができる．$j_l(kr)$ の漸近式を考慮に入れると，上の式を入ってくる波と出てゆく波に分けて，

$$r\psi(r,\theta) \sim \sum_l \left((-)^{l+1} \frac{2l+1}{2ik} \mathrm{e}^{-ikr} + \left(\frac{2l+1}{2ik} + f_l \right) \mathrm{e}^{ikr} \right) P_l(\cos\theta)$$

と書き直すことができる．y_l の漸近式は右辺の括弧のなかの大きさに等しいはずである．この条件によって a_l は一意的に定まり，f_l が位相のずれの関数として表わされる．結果は各番号について

$$a_l = \mathrm{i}^l \frac{2l+1}{k} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}, \qquad f_l = \frac{2l+1}{k} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} \sin\delta_l.$$

これらの式を (28) に代入すれば $f(\theta)$ が位相のずれ δ_l の関数として表わされる：

$$\boxed{f(\theta) = \lambda\!\!\!^{-} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} \sin\delta_l\, P_l(\cos\theta).} \tag{31}$$

ここで $\lambda\!\!\!^{-}$ は入射の波長である ($\lambda\!\!\!^{-} = 1/k$)．

y_l/r すなわち散乱の定常状態の角運動量 l の成分の漸近式と，関数 $(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)$ すなわち平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ の角運動量の成分の漸化式とをくらべるのは有益である：

$$\frac{y_l}{r} \sim \frac{2l+1}{2\mathrm{i}kr} \left((-)^{l+1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} + \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \right),$$

$$(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr) \sim \frac{2l+1}{2\mathrm{i}kr} \left((-)^{l+1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \right).$$

これらは両方とも同じ強さの入ってくる波と出てゆく波の重ね合わせからできている．入ってくる波はどちらの関数についても明らかに同じである．定常散乱波の出てゆく波は，平面波のそれとくらべて位数因子 $\exp(2\mathrm{i}\delta_l)$ がついているだけ違う．すなわち，散乱ポテンシャルの効果は，出てゆく部分波の一つ一つの位相をずらすことにある．

微分断面積を得るには $f(\theta)$ の絶対値の二乗をとればよい：

$$\sigma(\Omega) = \lambda\!\!\!^{-2} \sum_{ll'} (2l+1)(2l'+1) \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta). \tag{32}$$

角 (θ,φ) について積分すれば，全断面積 $\sigma_{\mathrm{tot.}}$ が得られる．ルジャンドルの多項式の直交関係を考えに入れると，これは級数

$$\boxed{\sigma_{\mathrm{tot.}} = 4\pi\lambda\!\!\!^{-2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l} \tag{33}$$

の形に書き表わされ，

$$\sigma_l = 4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2} \sin^2\delta_l \tag{34}$$

は，それぞれの l に対応する角運動量の散乱に対する寄与を表わす．不等式

$$\sigma_l \leqslant 4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2} \tag{35}$$

に注意しよう．σ_l が最大値に到達するのは，位相のずれが π の《半整数》倍であるとき，すなわち

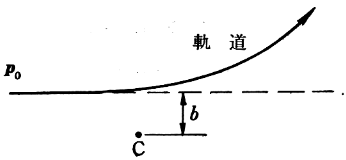
$$\delta_l = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi \qquad (n = \text{整数})$$

のときである.

§ 9. 衝突の半古典的表現. 衝突パラメータ

中心力場による1古典粒子の衝突を考えよう. 入射粒子のエネルギー $E = p^2/2m$ を固定すれば, 各軌道は衝突パラメータ b によって特徴づけられる. b は力の中心 C から初期運動量 p_0 を通る直線までの距離として定義される (10•5図). このような衝突においては, 角運動量 L は運動の定数である. b は L に正比例する:

$$L = bp.$$



10•5図　力の中心Cによる古典粒子の散乱: p_0 = 初期運動量, b = 衝突パラメータ.

力の場が有限な半径 r_0 をもつ場合, すなわち

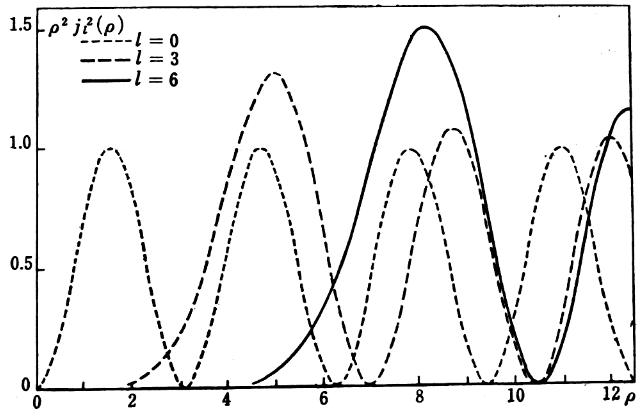
$$r > r_0 \quad \text{のとき} \quad V(r) = 0$$

となる場合には, $b < r_0$ であるか $b > r_0$ であるかによって, 入射粒子は偏向を受けたり受けなかったりする. 偏向を受けるのは角運動量が十分小さい粒子に限る.

量子論における衝突は, 古典的な衝突の現象とは非常に違った現象である. それは本質的に波の散乱という現象である. それにもかかわらず, ある距離 r_0 より遠くで散乱ポテンシャル $V(r)$ が無視できるときには——必ずしも0にならなくても——この現象は, 有限な半径 r_0 をもつポテンシャルによって古典粒子のビームが受ける散乱といくつかの類似点を示す. $l\lambda\!\!\!^{-} \geq r_0$ のときには, 一般的な規則として, 部分波 l の寄与 σ_l が無視できる(11). これに反して $l\lambda\!\!\!^{-} < r_0$ のときには, σ_l は0と最大値 $4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2}$ とのあいだにあるすべての値をとることができる. この規則にしたがえば, 量子的粒子の散乱に対する波動 l の寄与と, 古典的粒子のビームの散乱において, 衝突パラメータが $l\lambda\!\!\!^{-}$ と $(l+1)\lambda\!\!\!^{-}$ とのあいだにある粒子——したがって角運動量が $l\hbar$ と $(l+1)\hbar$ のあいだにある粒子——の寄与とのあいだに, ある類似が存在する.

前述の規則はつぎのような半定量的推論に基づいている. 入射波は決まった角運動量をもつ球面波の重ね合わせである. 角運動量 l の部分波に対応する項の動径部分は $j_l(r/\lambda\!\!\!^{-})$ に比例し, したがって球殻 $(r, r+\mathrm{d}r)$ に存在する相対的確率密度は $r^2 j_l^2(r/\lambda\!\!\!^{-})$ に等しい. この密度は $r < \sqrt{l(l+1)}\,\lambda\!\!\!^{-}$ である限り非常に小さく, $r > \sqrt{l(l+1)}\,\lambda\!\!\!^{-}$ のときおおよそ0と1のあいだを振動する (10•6図を参照). $r_0 < l\lambda\!\!\!^{-}$ ならば, 波は事実上ポテンシ

(11) この規則は絶対的なものではない. §14では共鳴の現象に関連していくつかの例外が見いだされよう.



10・6 図 $l = 0, 3, 6$ に対する関数 $\rho^2 j_l^2(\rho)$ のグラフ

ャルの強い領域に侵入しない．それゆえポテンシャルの存在によって波が大きな影響を受ける可能性はすこししかない．

ここで述べた議論は厳密なものではない．級数 (31) と (32) の収束の速さに関するもっと詳しい情報は§12で与えられよう．いずれにせよ，散乱ポテンシャルの有効範囲が数波長以上ひろがっていない限り，位相のずれによる方法はとりわけうまく断面積の計算に適する．

III. 有限な半径のポテンシャル

§ 10. 位相のずれと対数導関数の関係

$V(r)$ が空間の有限な範囲に完全に集中しており，まったく厳密に

$$r > r_0 \quad \text{のとき} \quad V(r) = 0$$

が成り立つと仮定しよう．

動径方程式 (29) を満たし原点で正則な解の対数導関数が点 r_0 においてとる値を q_l とする．すなわち

$$q_l = \left.\frac{r(\mathrm{d}y_l/\mathrm{d}r)}{y_l}\right|_{r=r_0} \tag{36}$$

(ここで採用した定義はふつうの定義と因数 r だけ違う)．すでに知ったように，q_l はエネルギーの関数として単調減少である (第3章§8)．この関数の正確な形が問題のポテンシャル $V(r)$ によって異なることは明らかである．

$V(r)$ は領域 $r > r_0$ で0になるから，q_l と δ_l のあいだには $V(r)$ の特殊な形によら

ない関係がある．すなわち q_l を与えるだけで解の漸近的挙動を決定することができる．

今後は y_l が

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l\right) \tag{37}$$

となるように規格化されているものとする．それゆえ外部の領域では

$$y_l = kr[\cos\delta_l\cdot j_l(kr)+\sin\delta_l\cdot n_l(kr)] \qquad (r>r_0)$$

となる．のちの議論のためには

$$\xi = kr$$

と置き，出てゆく波と入ってくる波

$$u_l^{(\pm)}(\xi) = \xi[n_l(\xi)\pm \mathrm{i}\, j_l(\xi)] = \xi h_l^{(\pm)}(\xi)$$

を導入するとつごうがよい．$u_l^{(\pm)}$ のロンスキアンは ξ に無関係な量で，

$$u^{(-)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}u^{(+)}-u^{(+)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}u^{(-)} = 2\mathrm{i}. \tag{38}$$

外部の領域で

$$y_l = \frac{1}{2\mathrm{i}}(u_l^{(+)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}-u_l^{(-)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_l}) = \mathrm{Im}\, u_l^{(+)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} \qquad (r>r_0). \tag{39}$$

$r=r_0$ において対数導関数が連続となる条件により，関係式

$$q_l = \xi\frac{\mathrm{Im}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}(\mathrm{d}u_l^{(+)}/\mathrm{d}\xi)}{\mathrm{Im}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}u_l^{(+)}}\bigg|_{\xi=kr_0} \tag{40}$$

が与えられる．これがわれわれの求めていた q_l と δ_l の関係である．

この関係をもっと取り扱い易い形にするには，

$$\begin{aligned} |u_l^{(\pm)}(kr_0)| &= v_l^{-1/2}, \\ u_l^{(\pm)}(kr_0) &= v_l^{-1/2}\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\tau_l}, \\ \frac{\xi(\mathrm{d}u_l^{(\pm)}/\mathrm{d}\xi)}{u_l^{(\pm)}}\bigg|_{\xi=kr_0} &= q_l^{(\pm)} \end{aligned} \tag{41}$$

と置くのがよい．(38) から関係式

$$\mathrm{Im}\, q_l^{(+)} = kr_0 v_l$$

が導かれる（問題3を参照)．v_l は1より小さい正の量で，これが小さくなるのは，kr_0 が小さくなるときおよび l が大きくなるときである．これは**透過因子**と名づけられている．

これらの記号を使って連続性の関係 (40) を書き表わすと，

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l} = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\tau_l}\frac{q_l-q_l^{(-)}}{q_l-q_l^{(+)}},$$

あるいはまた

$$\delta_l = \tau_l+\rho_l \tag{42}$$

となる．ただし

$$\rho_l = \arg(q_l - q_l^{(-)}) = \tan^{-1}\frac{kr_0 v_l}{q_l - \mathrm{Re}\, q_l^{(+)}}. \tag{43}$$

つまり，δ_l は二つの項の和の形に表わされ，第1項 τ_l は散乱ポテンシャルの特殊な形によらず，第2項 ρ_l は (43) からわかるように，q_l を媒介としてポテンシャルの形によって決まるものである．

ついでながら

$$y_l(r_0) = \frac{\sin\rho_l}{\sqrt{v_l}} \tag{44}$$

に注意しておこう．

§ 11. 低エネルギー ($\bar{\lambda}\to\infty$) における位相のずれの挙動

変数がごく小さい値をとるときの球ベッセル関数の挙動（付録 B (52)）がわかれば，(42)，(43) から $kr_0 \ll l$ のとき，言いかえるとエネルギーがごく低いかまたは角運動量がきわめて大きいときの δ_l の挙動を導き出すことができる．実際，$kr_0 \ll l$ ならば(*)

$$\tau_l \simeq -\frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l+1)!!\,(2l-1)!!},$$
$$v_l \simeq \frac{(kr_0)^{2l}}{[(2l-1)!!]^2}, \qquad \mathrm{Re}\, q_l^{(+)} \simeq -l+O(k^2r_0^2) \tag{45}$$

（これらの式は $kr_0 \ll 1$ のとき $l=0$ に対しても成り立つ）．

この§11ではエネルギーが0に近づくときの断面積の挙動を調べよう．

この極限において，実の量 q_l は増加しながら一つの極限 $\hat{q}_l$ に近づく．一般に $\hat{q}_l \neq -l$ であって，位相のずれ δ_l は k^{2l+1} のように0に近づく．すなわち

$$\delta_l \underset{k\to 0}{\sim} \frac{l+1-\hat{q}_l}{l+\hat{q}_l}\frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l+1)!!\,(2l-1)!!} \tag{46}$$

が得られる．振幅 f_l は δ_l/k に比例するから，k^{2l} のように0に近づく．したがって，エネルギーがごく低い極限においては断面積が等方性になる．なぜなら s 波の断面積 σ_0 を除けば，すべての部分断面積 σ_l が k^{4l} のように0に近づき（式 (34)），σ_0 は一般に0でない定数に近づくからである．

長さ

$$a = -\lim_{k\to 0} f_0 = -\lim\frac{\delta_0}{k} = \left(1-\frac{1}{\hat{q}_0}\right)r_0 \tag{47}$$

を散乱半径 (scattering length) と呼ぶことに定める．a はエネルギー0に対応する動径方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - U(r)\right]y_0 = 0$$

(*) ［訳注］ $(2l+1)!! = (2l+1)(2l-1)\cdots 5\cdot 3\cdot 1.$

を解いて求められる．すなわち y_0 の漸近線が r 軸を横ぎる点の横座標である．エネルギーのごく低い極限では，

$$\sigma_{\text{tot.}} = \sigma_0 = 4\pi a^2.$$

たまたま $\hat{q}_l = -l$ である場合は，エネルギーが0に近づくとき f_l は k^{2l-2} のように振舞う（$l=0$ に対しては例外で，$\hat{q}_0 = 0$ は $f_0 \sim \mathrm{i}/k$ を意味する）．このときは，状態 l において0エネルギーに共鳴があると言い，さきに述べた結論はつぎのように修正しなければならない．これが s 共鳴（$l=0$）ならば，a は無限大で σ_{tot}. は $1/E$ のように無限大に近づく．p 共鳴（$l=1$）ならば，$f(\theta)$ は式 $-a+b\cos\theta$ に近づき，断面積は有限のままであるがけっして等方性にならない．共鳴がもっと高い位数のものならば，エネルギーが0になるときの断面積の極限はこれに影響されない．

§12.　高位の部分波．級数の収束（$l\to\infty$）

エネルギーの値を一つはっきり決めておくと，漸近式（45）によって高位の位相のずれの漸近的な表示式を得ることもできる．l が十分大きいとき，式

$$k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}$$

は区間 $(0, r_0)$ においてつねに負の値をとりつづける．したがって方程式（29）の解 y_l はこの区間で《指数的な》挙動を示し，q_l は確かに正である．さらに，$l \gg kr_0$ ならば，(45) を使うことができ，$q_l + l$ は確かに0にならないから，十分大きな l に対して (46) と同様な漸近式

$$\delta_l \underset{l\to\infty}{\sim} \frac{l+1-q_l}{l+q_l}\,\frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l-1)!!\,(2l+1)!!} \tag{48}$$

が得られる．この式により，ポテンシャルが有限な半径をもつとき，部分波による級数展開が収束する速さについて一つの尺度が与えられる．こうして，§9で述べた大きさの程度に関する予想が確かめられる．

§13.　剛体球による散乱

有限な半径のポテンシャルが固い球であるとき，言いかえれば $V(r)$ が領域 $r < r_0$ で無限に反発的であり，領域 $r > r_0$ では0になるとき，すなわち

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & (r < r_0 \text{ のとき}) \\ 0 & (r > r_0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

であるならば，§10の式はすべて簡単になる．波動関数は球の表面で0になるはずであるから，どんな l に対しても $y_l(r_0) = 0$　$(q_l = -\infty)$，したがって（式 (44)）$\rho_l = 0$，すなわち

$$\delta_l = \tau_l = \arg u_l^{(-)}. \tag{49}$$

途中の計算を省略すれば，このことから

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{j_l^2(kr_0)}{j_l^2(kr_0)+n_l^2(kr_0)} \tag{50}$$

と，特別な場合として

$$\sigma_0 = 4\pi r_0^2 \left(\frac{\sin kr_0}{kr_0}\right)^2$$

が導き出される.

エネルギーがごく低いときは，§11 で研究したように，微分断面積は等方性となり，全断面積は極限として

$$\lim_{k\to 0} \sigma_{\text{tot.}} = \lim_{k\to 0} \sigma_0 = 4\pi r_0^2 \tag{51}$$

をもつ. これは衝突の長さ $a = r_0$ に対応する.

エネルギーが増すにつれて，高位の部分波の寄与がだんだん大きくなり，散乱の非等方性がだんだん顕著になる. エネルギーがきわめて大きい ($\lambda \ll r_0$) ときは，位数 l の大きな値に対するベッセル関数の漸近的性質を用いて，微分断面積と全断面積が評価される. 結果は

$$\sigma(\Omega) \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{1}{4} r_0^2 \left(1+\cot^2\frac{\theta}{2}\cdot J_1^2(kr_0\sin\theta)\right) \tag{52}$$

$$\lim_{k\to\infty} \sigma_{\text{tot.}} = 2\pi r_0^2 \tag{53}$$

となる[12].

ここで関係式 (53) に対しておおよその証明を与えておこう. 関数 $j_l(\xi)$ と $n_l(\xi)$ の一般的な挙動がわかれば，それから関数

$$g_l(\xi) = \frac{j_l^2(\xi)}{j_l^2(\xi)+n_l^2(\xi)}$$

の挙動を導くことができる. これは $\xi = 0$ において $\xi^{4l+2}/[(2l+1)!!\,(2l-1)!!]^2$ のように 0 となり，ξ が増すとき，$\xi = l$ の近くまでは規則的に増加し，それ以後は法則

$$g_l(\xi) \underset{\xi\to\infty}{\sim} \sin^2\left(\xi - \frac{1}{2}l\right)\pi \tag{54}$$

にしたがって限りなく振動する. それゆえ，和

---

(12) MORSE と FESHBACH，前掲書（第 6 章の脚注 (9)），p. 1551 を参照. $J_1(x)$ は 1 位のベッセル関数である. x が 0 から $+\infty$ まで増すとき，$J_1(x)$ は 0 から $[J_1(x) \sim x/2]$ 増加して最初の極大値 $J_1(1.84) \simeq 0.58$ に達し，それからは減少して $x \simeq 3.83$ において初めて 0 になる. その後は漸近式

$$J_1(x) \underset{x\to\infty}{\sim} \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{1/2} \cos\left(x - \frac{3}{4}\pi\right)$$

にしたがって限りなく振動する.

$$\sigma_{\text{tot.}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, g_l(kr_0)$$

において，$l > kr_0$ の項による寄与は無視され，$l < kr_0$ の項による寄与はおおよそのところ $g_l(kr_0)$ を漸近式 (54) に置き換えることによって評価される．これから

$$\sigma_{\text{tot.}} \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{kr_0} (2l+1) \sin^2\!\left(kr_0 - \frac{1}{2}l\pi\right).$$

右辺の和を計算するため，順に2項ずつまとめ，k の値をきわめて大きくすると，極限において

$$\int_0^{kr_0} l\,\mathrm{d}l = \frac{1}{2}k^2 r_0^2$$

となる．これから (53) が導かれる．

意外なことには，波長が小さくなる ($kr_0 \gg 1$) 極限において，われわれが得た値は半径 r_0 の固い球による古典粒子の散乱の断面積と一致しない．古典の全断面積は

$$\sigma_{\text{cl.}} = \pi r_0^2$$

であり，きわめて短い波長の極限における量子的な結果の半分である．同様に，古典的な微分断面積は等方性で $r_0^2/4$ に等しい．これは $\sigma(\Omega)$ の漸近式 (52) の初項に等しい．

実際には，ポテンシャルが点 $r = r_0$ において突然不連続に変わるため，波長がきわめて短いときでさえ，ポテンシャルがゆるやかに変化するとはけっして考えられないから，この現象の波動的性格はどうしても無視できないのである．ここに見られた波動的現象は，微分断面積の漸近式 (52) を調べればわかるように，光学に現われる回折の現象とまったく類似のものである．(52) は二つの項を含んでいる．第1項は古典的な微分断面積と同じ等方性の《反射》の項である．第2項

$$\frac{1}{4} r_0^2 \cot^2\!\left(\frac{1}{2}\theta\right) \cdot J_1^2(kr_0 \sin\theta)$$

の寄与は本質的に $\lambda\!\!\!^{-}/r_0$ 程度の小さな角に限られているから，これはきわめて非等方性であり，入射波の軌道上にあって完全反射する球面がつくる影の結果として生じる《回折》(shadow scattering) の項である．

IV. 散乱の共鳴

§ 14. 深い井戸による散乱

有限な半径をもつポテンシャルの他の例として，第9章§10の井戸（球型ポテンシャル）をもう一度考える．

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \qquad V_0 = \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m}, \qquad K^2 = K_0^2 + k^2$$

と置き，井戸がごく深いときいろいろな部分波の挙動をエネルギーの関数として調べてみ

よう．もっと詳しく言えば，

$$Kr_0 \gg l \tag{55}$$

$$K \gg k\,. \tag{56}$$

と仮定する．この場合には，(43) の右辺に代入するべき q_l の値は，よい近似で

$$q_l \simeq Kr_0 \cot\left(Kr_0 - \frac{1}{2} l\pi\right) \tag{57}$$

となる．

エネルギーの低いとき——すなわち条件 (56) によって $E \ll V_0$——における $\delta_l(E)$ の一般的な挙動は視察によって容易に求められる．

(42) と (43) により，δ_l は $\tau_l, kr_0 v_l, \mathrm{Re}\, q_l^{(+)}$ および q_l を媒介としてエネルギーに依存する．初めの三つは kr_0 の単調関数（τ_l は減少関数，$kr_0 v_l$ と $\mathrm{Re}\, q_l^{(+)}$ は増加関数）であり，それらの原点における挙動は (45) で与えられ，漸近領域（$kr_0 \gg l$）における挙動は式

$$\begin{gathered} \tau_l \underset{kr_0\to\infty}{\sim} -\left(kr_0 - \frac{1}{2} l\pi\right), \\ \lim_{kr_0\to\infty} v_l = 1, \qquad \lim_{kr_0\to\infty} \mathrm{Re}\, q_l^{(+)} = 0 \end{gathered} \tag{58}$$

によって与えられる．われわれの関心をひくエネルギーの区域では，これら三つの関数は比較的緩やかに変化する．これに反して，対数導関数 q_l はエネルギーの単調減少関数であるが，きわめて急激に変化し，$Kr_0 = l\pi/2 + n\pi$（n は整数）となるようなエネルギーの値に対して，q_l のグラフはつぎつぎに垂直な漸近線をもつ．隣りあう二つの漸近線のあいだのエネルギーの差はおおよそ

$$D \simeq \pi \frac{\hbar^2 K}{mr_0} \simeq \pi \frac{V_0}{K_0 r_0} \tag{59}$$

である．

エネルギーがこの大きさだけ変わるとき，$|q_l|$ はほとんどつねに Kr_0 程度あるいはそれより大きく，ほとんど全区間にわたって

$$|q_l - \mathrm{Re}\, q_l^{(+)}| \gg kr_0 v_l$$

が成り立つ．位相のずれの第 2 項 ρ_l は（$n\pi$ を除いて）ごく小さい，すなわち

$$\rho_l \simeq \frac{kr_0 v_l}{q_l - \mathrm{Re}\, q_l^{(+)}} \lesssim \frac{k}{K} v_l$$

であるが，τ_l の方はがんらい何の制限もない．それゆえ

$$\delta_l \simeq \tau_l$$

と書くことができる．位相のずれは同じ半径の固い球によって与えられるずれと実際上同じである．したがってエネルギーの変域の大部分では，このポテンシャルによる各部分波

の散乱は固い球による散乱と同じである．ここには《ポテンシャル散乱》(potential scattering) が見られる．入射波は事実上内部領域に侵入しない．

しかしながら，$q_l=\mathrm{Re}\,q_l^{(+)}$ となる点 E_r のまわりには，

$$|q_l-\mathrm{Re}\,q_l^{(+)}|\lesssim kr_0v_l$$

となるようなエネルギーの小領域が存在する．二つの量

$$\gamma=-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}q_l}\bigg|_{E=E_\mathrm{r}},\qquad \Gamma=2kr_0v_l\gamma\qquad(\gamma>0)\tag{60}$$

を定義する．Γ は問題になっているエネルギーの領域の幅である．

$$\frac{\Gamma}{D}\simeq\frac{2}{\pi}\frac{k}{K}v_l\ll1$$

に注意しよう[13]．E_r をはさむ数 Γ 程度の範囲でエネルギーが変化するとき，$q_l-\mathrm{Re}\,q_l^{(+)}$ は kr_0v_l よりずっと大きい値から $-kr_0v_l$ よりずっと小さい値まで減少し，ρ_l は $n\pi$ に近い値から突然 $(n+1)\pi$ に近い値に移る．部分断面積 σ_l は急激に変化し，その途中で極大値 $4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2}$ に到達する．われわれはここに l 共鳴があるという．E_r を共鳴のエネルギー[14]，Γ を共鳴の幅と定義する．Γ は γ という量と因数 kr_0v_l の積であって，γ は内部領域におけるポテンシャルの一般的な形によって決まり（実際上 l には無関係である），kr_0v_l は外部領域における波の挙動によって決まる（kr_0 が小さいほど，また l が大きくなるほど小さくなる）．

共鳴の領域は十分に狭いから，ρ_l を表わす式においては，$q_l(E)$ のグラフを点 $E=E_\mathrm{r}$ における接線に置き換えることができる．それゆえ

$$\rho_l\simeq\tan^{-1}\frac{\Gamma}{2(E_\mathrm{r}-E)}.\tag{61}$$

内部領域において動径関数を規格化するために連続の条件 (44) を用いると，（共鳴の近くで，$\Gamma\ll\Delta E\ll D$ であるようなエネルギーの区間において成り立つ）近似式として，

---

(13) 実際，(57) によれば

$$\frac{\mathrm{d}q_l}{\mathrm{d}(Kr_0)}=-Kr_0\left(1+\frac{q_l(q_l-1)}{(Kr_0)^2}\right).$$

$Kr_0\gg l$ であり，$E=E_\mathrm{r}$ のとき $|\mathrm{Re}\,q_l^{(+)}|\lesssim l$，$\mathrm{d}q_l/\mathrm{d}K\simeq-Kr_0^2$ であるから，

$$\gamma\simeq\frac{\hbar^2}{mr_0^2},\qquad\Gamma\simeq2v_l\frac{\hbar^2k}{mr_0}.$$

(14) ポテンシャル散乱の項があるために，σ_l を極大にするエネルギーの値は共鳴のエネルギーといくらか違う．後者は ($n\pi$ を除いて) $\rho_l=\pi/2$ とするエネルギーと定義される．共鳴のとき $\tau_l=\pi/2$ となり，したがって $E=E_\mathrm{r}$ で σ_l が 0 になることさえ起こりうる．関数 $\sigma_l(E)$ が突然 0 に落ちることから，共鳴の領域を通過したことがわかる．

$$y_l = \frac{1}{\sqrt{v_l}} \frac{\Gamma}{\sqrt{4(E-E_r)^2+\Gamma^2}} Krj_l(Kr) \qquad (r < r_0) \tag{62}$$

が見いだされる．それゆえ l 共鳴を通過するとき，これに伴って内部領域における l 位の部分波の強さが一時急激に増大する．

s 波の場合には上に述べた解析がたいそう簡明になる．まったく厳密な式として

$$\tau_0 = -kr_0, \quad v_0 = 1, \quad \mathrm{Re}\, q_0^{(+)} = 0, \quad q_0 = Kr_0 \cot Kr_0,$$

$$\delta_0 = -kr_0 + \tan^{-1}\left(\frac{k}{K} \tan Kr_0\right)$$

が成り立つ．解 y_0 は具体的な形に表わされ，

$$y_0 = \begin{cases} \sin(kr+\delta_0) & (r > r_0) \\ \dfrac{k}{\sqrt{k^2+K_0^2 \cos^2 Kr_0}} \sin Kr & (r < r_0). \end{cases}$$

いくつかの記号の違い（$L \to r_0$, $K \to K_0$, $\eta K \to k$, $\xi K \to K$, $\varphi_1 \to \rho_0 - \pi/2$）を除けば，$s$ 散乱の問題は，第3章§6の1次元井戸型ポテンシャル（場合b)）による波の反射の問題と同じであり，共鳴効果についての議論はそのままここでも繰り返すことができる．

§ 15. 共鳴散乱の研究．準安定状態

共鳴の現象は微視的な物理学においてしばしば見られるものである．井戸の場合に説明した型の散乱の共鳴は，空間のある一部分で急に引力が強くなるようなときには，他の形のポテンシャルによってもまたひき起こされる．この型の現象は重要であるから，散乱の l 共鳴について詳しく調べよう．ここでなされる特殊な研究は井戸に関するものであるけれども，もっと一般なポテンシャルにもほとんどそのまま拡張される．この研究のなかに，ポテンシャルの形は対数導関数 q_l の変化の法則を通してしか入ってこない．

議論を簡単にするために，共鳴は十分狭く，互いに十分離れており，その結果われわれが調べているエネルギーの領域においては，ただ一つの部分波が共鳴を示すと仮定する．さらに，共鳴のエネルギーは十分に低く，

$$kr_0 \ll 1 \tag{63}$$

であるから，散乱に対するポテンシャル散乱の項の寄与はすべて無視できるとする(15)．言いかえると，δ_l 以外の位相のずれはすべて事実上0であり，δ_l は入射エネルギー E の関数として，法則

$$\delta_l \simeq \rho_l = \tan^{-1} \frac{\Gamma}{2(E_r - E)}$$

にしたがって変化する．それゆえ

(15) 断面積に対するこれらの項の寄与は $4\pi r_0^2$ 程度であり，共鳴のエネルギーにおける l 共鳴の寄与は $4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2} = 4\pi(2l+1)/k^2$ 程度である．

$$e^{i\delta_l}\sin\delta_l=\frac{\tan\delta_l}{1-i\tan\delta_l}\simeq-\frac{\Gamma}{2(E-E_r)+i\Gamma}$$

で，散乱振幅は簡単に

$$f(\theta)\simeq-\frac{2l+1}{k}P_l(\cos\theta)\frac{\Gamma}{2(E-E_r)+i\Gamma}\tag{64}$$

と書かれる．

共鳴を横ぎるとき，$f(\theta)$ の絶対値と $f(\theta)$ の偏角の導関数とが非常に際立ったピークを示す．われわれは

$$\sigma(\Omega)=|f(\theta)|^2=(2l+1)^2P_l^2(\cos\theta)\lambda\!\!\!^{-2}\times\frac{\Gamma^2}{4(E-E_r)^2+\Gamma^2}\tag{65}$$

$$\frac{d}{dE}[\arg f(\theta)]=\frac{d\delta_l}{dE}=\frac{2}{\Gamma}\times\frac{\Gamma^2}{4(E-E_r)^2+\Gamma^2}\tag{66}$$

を得る．

(65) によれば，共鳴の近くにおいて――ポテンシャル散乱の効果が無視される限り――立体角に対する散乱の分布はエネルギーに関係なく l だけで決まること，また全断面積はエネルギーの関数として《ローレンツの法則》

$$\sigma_{tot.}=4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2}\times\frac{\Gamma^2}{4(E-E_r)^2+\Gamma^2}\tag{67}$$

にしたがって変化することが示される．

(66) を解釈するためには，§4から§6でなされた波束の散乱の研究を参照することが必要である．実際，§4—6の記号を使えば，

$$\frac{\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{s}}{v}=\hbar\frac{d}{dE}[\arg f(\theta)],$$

したがって (66) は散乱波の伝播における遅れを与えることがわかる (脚注 (8) を参照)．この遅れはエネルギーの関数として全断面積と同じくローレンツの法則にしたがい，共鳴のエネルギーにおいて最大値 $2\hbar/\Gamma$ に到達する．

以上のことから，共鳴の現象をつぎのように言い表わすことができる．共鳴のエネルギーから遠いところでは，入射波は事実上内部領域に侵入しない（(62) を参照)．そして固い球に出会ったときのようにすべてのことが起こる．この波のうち相対的に無視できる小さな部分だけが散乱を受け，この散乱は事実上遅れなく（$-r_0/v$ 程度の遅れで）ひき起こされる．共鳴のエネルギーの近くでは，入射波は内部領域に深く侵入する．そして入射波束の大きな部分が $\hbar/\Gamma$ 程度の時間内部領域にとどまり，その後散乱波の形で再放出される．このようにして，共鳴のとき大きな散乱断面積の存在することが説明される．再放出に先立つ上記の期間を通じて，この粒子が内部領域またはその近くに存在する確率のきわめて大きいことは束縛状態の場合に似ている．しかし束縛状態は定常状態であり，その寿

命が無限大であるのに対して，ここで考察した準安定状態は $\hbar/\Gamma$ 程度の寿命をもつ．したがってこの状態のエネルギーは厳密に決まった値ではなく，これを表わす波動のエネルギーは，時間-エネルギー不確定性関係により，Γ 程度のひろがりをもつ．こうしてわれわれは各共鳴に一つの準安定状態を結びつけるに至った．この状態の寿命は $\hbar/\Gamma$ であり，そのエネルギーは平均すると共鳴のエネルギー E_r に等しいが，共鳴の幅 Γ に等しいひろがりをもっている．

§ 16.　準安定状態の寿命の観測

ごく厳密には，共鳴散乱の現象についてこのように半古典的な説明をあまり遠くまで推し進めると矛盾が生じる．事実，§4—6 で述べたように断面積を観測する場合の正常な条件の下では，いま問題にしたばかりの準安定状態を明らかにすることは全然できない．実際，与えられたエネルギーに対する断面積の測定を行なうためには，エネルギーのひろがり ΔE が十分小さく，散乱振幅が区間 ΔE において事実上一定でなければならない．共鳴の領域において，このことは

$$\Delta E \ll \Gamma$$

を仮定している．この条件が満たされるとき，エネルギーの関数として断面積が変化する法則を共鳴の領域において明らかにすることが実際にできる．他方，衝突の時間 $\hbar/\Delta E$，すなわち波束がすっかり散乱領域に入ってしまうまでに必要な時間は，準安定状態の寿命 $\hbar/\Gamma$ よりずっと長い．したがって後者はまったく観測できない（脚注 (8) を参照)．

準安定状態を明らかにするためには，それを（ボーアの意味における）相補的な実験の条件，すなわち

$$\Delta E \gg \Gamma \tag{68}$$

の下に置く必要がある．

事柄を明確にするために（注 (4) を参照)，§5 で取り扱った型の波束を考え，これが条件（9）と条件（68）を同時に満たすとしよう．さらに $E_r \gg \Delta E \gg \Gamma$(16) を仮定する．われわれは §4—6 の記号を採用し，書き方が複雑になるのをすべて避けるために，$\boldsymbol{b}=0$，$t_0=0$ とする．$f(\theta)$ の式（64）を（17）に代入すると，散乱波束の漸近式がつぎのように得られる：

$$\Psi^{(d)} \sim -(2l+1)\,P_l(\cos\theta)\frac{\Gamma}{2}\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k_r r - E_r t/\hbar)]}I}{r}$$

$$I=\int\frac{A(k'-k)}{E'-E_r+\dfrac{1}{2}\mathrm{i}\Gamma}\exp\left[\mathrm{i}(k'-k_r)\,r-\mathrm{i}(E'-E_r)t/\hbar\right]\frac{\mathrm{d}k'}{k'}$$

---

(16) この制限と条件（63）は本質的なものではないが，これらによれば最終結果がいっそう簡単な形になる．これらが条件（9）や（68）と同時に満たされるためには，

$$v_l \ll kr_0 \ll 1$$

の成り立つことが必要である．

(記号 $E_{\rm r} = (1/2)\hbar^2 k_{\rm r}^2/m = (1/2)mv_{\rm r}^2$ を用いている). 積分 I において, 主な寄与をもたらすのは $A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})/(E'-E_{\rm r}+{\rm i}\Gamma/2)$ が大きくなる領域である. 極座標に移って,

$$\mathrm{d}\boldsymbol{k}' = k'^2 \mathrm{d}\Omega' \mathrm{d}k' = (mk'/\hbar^2)\mathrm{d}\Omega' \mathrm{d}E'$$

および $\boldsymbol{k}' = k'\boldsymbol{u}'$ と置く. 角に関する積分には $A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$ しか入ってこない. $\mathrm{d}E'$ に関する積分については, 仮定 (68) により, 主な積分範囲は領域 $|E'-E_{\rm r}| \lesssim \Gamma$ だけであり, ここでは $A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$ を $A(k_{\rm r}\boldsymbol{u}'-\boldsymbol{k})$ に, k' をそのテイラー展開の初めの2項

$$k' \simeq k_{\rm r} + \frac{1}{\hbar v_{\rm r}}(E'-E_{\rm r})$$

に置き換えることができる ($\Gamma \ll E_{\rm r}$ と仮定している). したがって

$$I \simeq \frac{m}{\hbar^2} A_{\rm r} F\left(t-\frac{r}{v_{\rm r}}\right)$$

と書くことができる. ただし

$$A_{\rm r} = \int A(k_{\rm r}\boldsymbol{u}'-\boldsymbol{k})\mathrm{d}\Omega', \qquad F(\tau) = \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-{\rm i}(E'-E_{\rm r})\tau/\hbar}}{E'-E_{\rm r}+\frac{1}{2}{\rm i}\Gamma}\mathrm{d}E'$$

と定めた. I のこのような表わし方が正しいのは, $|\tau| \gg \hbar/\Delta E$ のときだけであることを読者は容易に確かめるであろう.

$$F(\tau) = \int_{-(2E_{\rm r}/\Gamma)}^\infty \frac{\exp[-{\rm i}\Gamma\tau z/2\hbar]}{z+{\rm i}}\mathrm{d}z$$

であることに注意する. $|\tau| \gg \hbar/E_{\rm r}$ であるから, この積分の下端を $-\infty$ に替えることができ, 積分 $F(\tau)$ は留数の方法により容易に計算される. すなわち

$$F(\tau) = \begin{cases} 0 & (\tau \ll -\hbar/\Delta E < 0 \text{ のとき}) \\ -2\pi{\rm i}\mathrm{e}^{-\Gamma\tau/2\hbar} & (\tau \gg \hbar/\Delta E > 0 \text{ のとき}). \end{cases} \tag{69}$$

結論として,

$$\Psi^{(d)} \sim -(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{mA_{\rm r}}{2\hbar^2}\Gamma \times F\left(t-\frac{r}{v_{\rm r}}\right)\frac{\mathrm{e}^{{\rm i}[k_{\rm r}r-(E_{\rm r}t/\hbar)]}}{r} \tag{70}$$

が得られる. この波のおおよその挙動は (69) で与えられた関数 $F(\tau)$ の性質から知られる. これは一つの出てゆく波で, $r = v_{\rm r}t$ という法則にしたがって移動する波面によって限られている. 与えられた一点では, 初めのうち波の強さは0であるが, その後突然0からある正の値に移る. この移行は波面の通過に対応し, おおよそ $\hbar/\Delta E$, すなわち $\hbar/\Gamma$ にくらべてごく短い時間のうちに行なわれる. それからこの強さは $\exp(-\Gamma t/\hbar)$ という法則にしたがって減少する.

指数関数的な減少を示すこの法則を観測するための典型的な実験では, さきに述べた条件を満たす波束のビームをごく短い時間だけ送りこみ, 立体角 $(\Omega, \Omega+\delta\Omega)$ に散乱される粒子を数える. そのためには, 散乱の中心からある距離 D をへだてて, この方向に一つの探知器を配置しておく. 入射波束のエネルギーのひろがり[17]は非常に大きい ($\Delta E \gg \Gamma$) から, 衝突の起こる時刻 $t=0$ はごく正確に定められる: $\Delta t \ll \hbar/\Gamma$. 計数結果の割合

---

(17) ここで問題にしているのは, 個々に考えられた各波束のエネルギーにおけるひろがりである.

は，計数器が置かれた場所における $|\Psi^{(d)}|^2$ の値によって与えられる．(70) によれば，これは $F^2(t-D/v_r)$ に比例する．波面が計数器に到達する時刻 D/v_r までは，粒子は一つも見いだされない．D/v_r は散乱の中心から《共鳴の速さ》v_r で放出された粒子が計数器に達するまでに要する時間である．それ以後，計数結果の割合は $\exp(-\Gamma t/\hbar)$ という法則で与えられ，これは平均寿命 $\hbar/\Gamma$ の準定安状態が時刻 $t=0$ につくられることに相当する．

さきに述べた観測の条件は放射性核の崩壊（α および β 放射，異性核の γ 放射）のとき実際に満たされているのがふつうである．

V. いろいろな公式と性質

§ 17. 位相のずれの積分表示

位相のずれのいくつかの性質といくつかの計算法は，位相のずれを適当な積分の形で表わすことから得られる．位相のずれの積分表示はきわめて多様である．その大部分は，対応する動径方程式の解を適当に定め，それにロンスキアン定理を適用することにより簡単に得られる．そのうちの一つをこの § 17 で与える．他の一つが § 20 で与えられよう．

われわれがつくろうとする表示式は，エネルギーが同じ値をとるとき，ポテンシャルの式 $V(r)$ と $\hat{V}(r)$ にそれぞれ対応する位相のずれ δ_l と $\hat{\delta}_l$ を比較することを目標とする．われわれは § 8 の記号を使い，$\hat{U}=2m\hat{V}/\hbar^2$ と置く．y_l は方程式 (29) の正則な解で，その漸近式は (37) で与えられる．同様に，動径方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\left(\varepsilon-\hat{U}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\right]\hat{y}_l=0 \tag{71}$$

の正則な解を $\hat{y}_l$ で表わせば，その漸近式は

$$\hat{y}_l \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi+\hat{\delta}_l\right).$$

ロンスキアン $W(y_l,\hat{y}_l)$ は原点では 0 であり，漸近的には極限

$$\lim_{r\to\infty} W(y_l,\hat{y}_l)=k\sin(\delta_l-\hat{\delta}_l)$$

に近づく．ロンスキアン定理によれば

$$W(y_l,\hat{y}_l)\Big|_a^b=-\int_a^b \hat{y}_l(U-\hat{U})y_l\,\mathrm{d}r.$$

a と b をそれぞれ 0 と ∞ に近づけると，

$$\sin(\delta_l-\hat{\delta}_l)=-\frac{2m}{\hbar^2 k}\int_0^\infty \hat{y}_l(V-\hat{V})\,y_l\,\mathrm{d}r \tag{72}$$

となる．

この重要な関係は，V と $\hat{V}$ が無限遠では $1/r$ より速く 0 に近づき，原点では $1/r^2$ 以上の強さの特異点をもたない限り，ポテンシャル $V,\hat{V}$ がどのような形をしていても成り

立つ．

$\hat{V}=0$ ならば，$\hat{\delta}_l=0,\ \hat{y}_l=krj_l(kr)$ を得る．この特殊な場合には，関係式 (72) は

$$\sin\delta_l=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty j_l(kr)\,Vy_l r\,\mathrm{d}r \tag{73}$$

と書かれる．

§ 18.　変化の向きと位相のずれの符号

(72) により，ポテンシャルを修正するとき位相のずれがどちらの向きに変わるかについて，いくつかの結論を引き出すことができる．実際，$\varDelta V\equiv V-\hat{V}$ が無限小ならば，$\varDelta\delta_l\equiv\delta_l-\hat{\delta}_l$ もまた無限小である．他方，解 y_l と $\hat{y}_l$ の差は方程式 (72) の右辺において無視することができるから，

$$\varDelta\delta_l=-\frac{2m}{\hbar^2k}\int_0^\infty y_l^2\,\varDelta V\,\mathrm{d}r. \tag{74}$$

ポテンシャルの変化 $\varDelta V(r)$ が全区間 $(0,\infty)$ で同じ符号をもつとき，位相のずれの変化 $\varDelta\delta_l$ は反対の符号をもつ．それゆえポテンシャルの増大（斥力を大きくすること）はつねに位相のずれを減少させ，ポテンシャルの減少（引力を大きくすること）はつねに位相のずれを増大させる．

今までのところ，位相のずれ δ_l は $2n\pi$ を除いて定められるものであった．この曖昧さを除くためには，0 から $V(r)$ までポテンシャルを連続的に変形させてみる．この操作のあいだに，位相のずれは 0 からある値 δ_l まで連続的に変わる．この値は，ポテンシャル 0 からポテンシャル $V(r)$ に移るために通る道筋には無関係であることが示される．今後位相のずれの定義としてわれわれが採用するのはこの値である．

このように決めた上で，ポテンシャル $V(r)$ がいたるところで反発的ならば，ポテンシャル 0 からポテンシャル $V(r)$ に移るには，すべて反発的な無限小の寄与をつぎつぎに加えてゆけばよい．(74) によれば，このような寄与はいずれも位相のずれを減少させる．したがって δ_l は負である．同様にして，$V(r)$ がいたるところで引力的ならば，δ_l は正である．

もっと一般に，

任意の r に対して $V(r)>\hat{V}(r)$ ならば，$\delta_l<\hat{\delta}_l$

任意の r に対して $V(r)<\hat{V}(r)$ ならば，$\delta_l>\hat{\delta}_l$．

§ 19.　ボルン近似

位相のずれ δ_l を正確に知るためには，原則として方程式 (29) を積分しなければならない．しかし $V(r)$ が十分小さいときには，この方程式の正則な解 y_l は自由球面波

$krj_l(kr)$ とわずかしか違わず，位相のずれ δ_l は0の近くにある．このときには関係式 (73) のなかの y_l を自由波に置き換えても大きな誤差は生じない．その結果は

$$\delta_l \simeq -\frac{2m}{\hbar^2} k \int_0^\infty j_l^2(kr) V(r) r^2 \mathrm{d}r. \tag{75}$$

これが《ボルン近似》において位相のずれを表わす式である．

r の変域の大部分において $V(r)$ が $E-(l(l+1)\hbar^2/2mr^2)$ にくらべて十分に小さいときには，わずかな誤差しか生じない．それゆえ，高エネルギーの場合，あるいは $V(r)$ が無限遠で十分速く減少することを条件として l の値が大きい場合，ボルン近似は良い近似であることが期待される．実際，(75) は V のべきによる展開の第1項である．したがって一つ高位の項を概算することにより誤差を評価することができる．この問題は第19章で取り扱われよう．

関係式 (72) から出発して，われわれはまた $\delta_l-\hat{\delta}_l$ に対する近似式を得る．すなわち

$$\delta_l-\hat{\delta}_l \simeq -\frac{2m}{\hbar^2 k}\int \hat{y}_l^2 (V-\hat{V})\,\mathrm{d}r. \tag{76}$$

この《一般化されたボルンの公式》は，ポテンシャルVとすこししか違わないポテンシャル $\hat{V}$ に関する動径方程式の正則な解 $\hat{y}_l$ が知られているときに有用である．この場合にはポテンシャル V に関する動径方程式を正確に解くことを必要としないで，δ_l の良い近似を上の式から得ることができる(18)．

§ 20. 有効距離の理論．ベーテの公式

エネルギーを一定に保ってポテンシャルを変形するときに位相のずれが受ける変化は §17 の諸公式によって調べることができる．この §20 でわれわれが求める公式は，エネルギーの関数として位相のずれが受ける変化に関するものである．これはポテンシャルが短い作用半径をもつとき，低エネルギーの極限においてとりわけ有用である．

方程式 (29) の正則な解の一つを u で表わす．さしあたりその規格化は決めないでおく．$\hat{u}$ は方程式 (71) の（正則でない）解であり，u と同じエネルギーの値に対応し，同じ漸近式をもち，規格化も同じであるとする．いま，異なる二つのエネルギー E_1, E_2 を考えよう．エネルギー E_1 に関する関数およびいろいろな量には添字1をつけ，エネルギ

(18) これはまた，ポテンシャル V の裾 (queue, tail) の効果を調べるときにも役立つ．r_0 の値を適当に選んで，ポテンシャル $\hat{V}$ を

$$\hat{V} = \begin{cases} V(r) & (r < r_0 \text{ のとき}) \\ 0 & (r > r_0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

とすればよい．$\hat{V}$ は有限半径のポテンシャルで，この型のポテンシャルの性質（第Ⅲ節，第Ⅳ節）をすべてもっている．$V-\hat{V}$ はポテンシャル V の裾である．これが小さいときには，この効果を公式 (76) によって評価することができる．

$-E_2$ に関するものには添字2をつける．ロンスキアン定理（第3章（27））によれば，

$$W(u_1, u_2)\Big|_a^b = (\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int_a^b u_1u_2\,dr,$$

および $\hat{u}$ に対する同様な式が得られ，これから

$$W(\hat{u}_1, \hat{u}_2)-W(u_1, u_2)\Big|_a^b = (\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int_a^b (\hat{u}_1\hat{u}_2-u_1u_2)\,dr.$$

$b\to\infty$ のとき，u と $\hat{u}$ が同じ漸近式をもつから，右辺の積分は収束し，b に関するロンスキアンの差は0に近づく．さらに $\lim_{a\to 0} W(u_1, u_2) = 0$ であるから，上の式は $b\to\infty$, $a\to 0$ となる極限において，

$$\lim_{a\to 0}\left[W(\hat{u}_1, \hat{u}_2)+(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int_a^\infty (\hat{u}_1\hat{u}_2-u_1u_2)\,dr\right] = 0 \tag{77}$$

と書かれる．u の規格化を適当に選ぶことによってこの基本関係式を書き直し，エネルギー E_1, E_2 における差 $\delta-\hat{\delta}$ の値が具体的に入ってくる形にすることができる．

この研究を s 波（$l=0$）の場合に限ろう[19]．さらにわれわれは $\hat{V}=0$ と仮定し，この特殊な場合には関数 $\hat{u}_1, \hat{u}_2$ を v_1, v_2 で表わす．u の規格化を条件 $v(0)=1$，すなわち

$$v = \cos kr+\cot\delta\sin kr$$

によって定めよう．このとき公式（77）は

$$W(v_2, v_1)\Big|_{a=0} \equiv k_1\cot\delta_1-k_2\cot\delta_2 = (\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int (v_1v_2-u_1u_2)\,dr \tag{78}$$

と書かれる．$r\to\infty$ のとき $V(r)$ が十分速く0に近づき，右辺の積分が収束するという条件の下に，上の式は $\varepsilon_2\to 0$ の極限においても成り立つ．エネルギー0に対する関数 u, v を u_0, v_0 で表わそう．（47）で定義された衝突の長さを a とするとき，

$$v_0 = 1-\frac{r}{a} \quad \text{および} \quad \lim_{\varepsilon\to 0} k\cot\delta = -\frac{1}{a}$$

に注意する．関係式（78）において $\varepsilon_1=\varepsilon, \varepsilon_2=0$ と置けば（10·7図を参照），

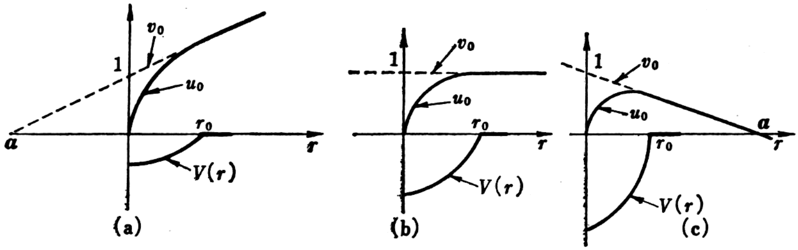
$$k\cot\delta = -\frac{1}{a}+\varepsilon\int (vv_0-uu_0)\,dr \tag{79}$$

となる（ベーテの公式）．

この関係式は厳密に成り立つ．右辺の積分がエネルギーの関数として緩やかに変化するとき，この式は有用である．このことが起こるのは，$V(r)$ が核物理学において見いだされる型の短い範囲をもつポテンシャルであるとき，すなわち空間が内部領域（$r<r_0$, $kr_0\ll 1$）と外部領域（$r>r_0$）に分けられ，内部では $|V|\gg E$，外部ではポテンシャル V

---

(19) $l\neq 0$ のときは，$\hat{u}_1$ と $\hat{u}_2$ が原点で $(1/r)^l$ の特異点をもつ．（77）において，$W(\hat{u}_1, \hat{u}_2)$ と $(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int \hat{u}_1\hat{u}_2\,dr$ の項は $(1/a)^{2l-1}$ のように無限大になる．しかしそれらの和は有限な極限に近づく．



10・7 図 有限な範囲をもつポテンシャル $V(r)=\varpi W(r)$ の深さが増すとき，有効距離の理論に入ってくるエネルギー 0 の s 波の関数（ϖ は深さのパラメータ：$\varpi=1$ は，束縛状態が起こるのにちょうどよい深さを示す）．
(a) $\varpi<1$ $(a<0)$, (b) $\varpi=1$ $(a=\infty)$, (c) $\varpi>1$ $(a>0)$.
注意：a は ϖ の減少関数であり，エネルギーが 0 の束縛状態が生じるような ϖ の値においてつねに垂直な漸近線をもつ．

が無視されるときである．このとき，積分に対する寄与は主として内部領域から与えられる．ここでは u を u_0 に v を v_0 に置き換えても大きな誤差は生じない．なぜなら，原点では厳密に $u=u_0=0$ と $v=v_0=1$ が成り立ち，関数 u と u_0 はこの領域全体で実際上同じ相対曲率 $(u''/u\simeq 2mV/\hbar^2)$ をもつからである（10・7 図）．したがってきわめて良い近似で

$$k\cot\delta\simeq-\frac{1}{a}+\varepsilon\int_0^\infty(v_0^2-u_0^2)\mathrm{d}r \tag{80}$$

が成り立つ．

$$r_{\text{eff.}}\equiv 2\int_0^\infty(v_0^2-u_0^2)\mathrm{d}r$$

という量はポテンシャル $V(r)$ を特徴づけるパラメータであり，ふつう**有効距離**と呼ばれている．

(80) の右辺の 2 項は，$k\cot\delta$ をエネルギーのべき級数に展開したときの最初の 2 項である．もっと高位の項まで書くためには，u と v を ε のべき級数に展開し，それらの式を (79) の右辺の積分に代入することが必要である[20]．上に述べた議論により，この展開式は内部領域において速く収束する．したがって $k\cot\delta$ をエネルギーの関数として展開した式の収束もまた同様にきわめて速い．

---

[20] G. Chew および M. Goldberger, *Phys. Rev.*, **75** (1949) 1637; H. A. Bethe, *Phys. Rev.*, **76** (1949), 38 を参照.

演習と問題

1.　$r\to\infty$ のとき $1/r$ より速く 0 に近づくポテンシャル $V(r)$ によって，波長 $\lambda\!\!\!^{-}$ の1粒子が受ける散乱を考える．$\Omega\equiv(\theta,\varphi)$ 方向における散乱振幅を $f(\Omega)$ とする．このとき

$$\sigma_{\text{tot.}}\equiv\int|f(\Omega)|^2\mathrm{d}\Omega=4\pi\lambda\!\!\!^{-}\,\mathrm{Im}\,f(0)$$

であることを示せ．ただし $f(0)$ は前方 $(\theta=0)$ における散乱振幅を表わす［ボーア=パイエルス=プラチェックの関係式］．

2.　核 a を核 A に当てることによって核 b と B をつくることができる：$a+A\to b+B$．実験室系において標的 A は静止している．この相互作用に加わる各粒子の質量を m_a, m_A, m_b, m_B とする．われわれは非相対論的近似を採用する：$m_a+m_A=m_b+m_B$．重心系に関する初めの状態 $(a+A)$ および終りの状態 $(b+B)$ の全運動エネルギーをそれぞれ E_i, E_f とし，重心系および実験室系に関する粒子 b の放出角をそれぞれ θ, θ_1 とする．重心の速さ V と，重心系に関する粒子 b の速さ v_b の比を τ で表わす，すなわち

$$\tau=\frac{V}{v_b}=\left[\frac{m_a m_b}{m_A m_B}\frac{E_i}{E_f}\right]^{1/2}$$

とするとき，θ_1 は θ の関数として関係式 (24) で表わされることを示せ．

3.　§10で導入された量 $\tau_l, v_l, q_l^{(+)}$（定義 (41)）のあいだにあるつぎの関係を証明せよ：

$$v_l=-\frac{\mathrm{d}\tau_l}{\mathrm{d}\xi},\qquad \mathrm{Im}\,q_l^{(+)}=\xi v_l,\qquad \mathrm{Re}\,q_l^{(+)}=-\frac{1}{2}\frac{\xi}{v_l}\frac{\mathrm{d}v_l}{\mathrm{d}\xi}.$$

4.　WKB 近似では位相のずれ δ_l が公式

$$\delta_l=\lim_{R\to\infty}\left[\int_a^R\sqrt{k^2-U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}}\,\mathrm{d}r-\int_{a_0}^R\sqrt{k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}}\,\mathrm{d}r\right]$$

によって与えられることを示せ．δ_l, k および $U(r)$ の定義は§8のものと同じである．積分の下端 a および a_0 は対応する被積分関数の零点である［$k^2-U(r)-l(l+1)/r^2$ がいくつかの零点をもつときは，そのうちの最大のものを a とする］．この近似が成り立つための条件を論ぜよ［この方法を l の小さな値に対して適用しうるためには，Langer の勧め（第9章問題6を参照）にしたがい，これら二つの積分のなかの $l(l+1)$ を $(l+1/2)^2$ に置き換えることが必要である］．

5.　有効距離の理論を p 波の散乱に適用せよ．これにより，エネルギーの関数としての $k^3\cot\delta_1$ の展開式が与えられることを示し，この展開式の最初の2項の式を求めよ（$\delta_1=p$ 波の位相のずれ）．

第11章　クーロン相互作用

§1. 序　　　説

それぞれ Z_1e, Z_2e の電荷をもつ二つの粒子の相互の距離を r とする．これら二つの粒子の相互作用の静電ポテンシャルはクーロン・ポテンシャル

$$V(r) = \frac{Z_1Z_2e^2}{r}$$

である．これら二つの粒子の運動量をそれぞれ $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2$ とし，質量を m_1, m_2, 位置を $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ $(\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$ とする．これらの相互作用が純粋にクーロン的ならば，それらの変化はハミルトニアン

$$\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2} + \frac{Z_1Z_2e^2}{r}$$

によって支配される．

第９章で述べた方法によれば，重心の運動と相対粒子の運動が分離される．相対粒子の運動はハミルトニアン

$$H \equiv \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{Z_1Z_2e^2}{r} \tag{1}$$

によって支配され，m は換算質量

$$m = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2} \tag{2}$$

である．それゆえ，クーロン相互作用をしている２粒子の量子系の取り扱いは，中心力ポテンシャル $Z_1Z_2e^2/r$ のなかにある１粒子系の取り扱いに帰着する．

r が大きな値をとるとき緩やかに減少するために，第９章と第10章で得られた中心力ポテンシャルの性質のうち，いくつかのものはクーロン・ポテンシャルに適用できない．特に散乱の問題において，定常解の漸近的挙動が短い作用半径をもつポテンシャルの場合とくらべて簡単でなくなり，その結果，位相のずれの定め方を修正する必要が生じる．さらに，角変数と動径変数の分離による散乱の取り扱いも，直接的に明白な利益をもたらさない．それは球面調和関数による散乱振幅の展開がきわめて遅く収束するからである．

他方，クーロン・ポテンシャル内の１粒子のシュレーディンガー方程式を解くことは，どのような場合も，ラプラスの微分方程式を解くことに帰着させることができる．この方

程式は関数論でよく知られたものである．したがってクーロン相互作用に関する最も興味深い量，すなわち束縛状態のエネルギー・スペクトルと散乱断面積が正確に決定される．

本章は二つの節を含む．はじめの節は水素原子の束縛状態の研究にあてられるが，この研究は水素類似原子にも，もっと一般には $1/r$ の相互引力ポテンシャルにしたがう2粒子系にも容易に拡張される．第II節はクーロン散乱の諸問題を取り扱う．

I．水素原子

§2. 水素原子のシュレーディンガー方程式

クーロン相互作用にある二つの物体の系のうち最も簡単なのは水素原子である．二つの粒子つまり電子と陽子が相互引力ポテンシャル $-e^2/r$ にしたがっている．この電子－陽子系の換算質量 m は電子の質量よりごくわずかだけ小さい．すなわち $(m_e-m)/m_e \simeq 5\times10^{-4}$．この電子－陽子系の重心系に関するエネルギーを E とする．相対粒子の波動関数 $\psi(r)$ はシュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle-\frac{e^2}{r}\right]\psi(r) = E\psi(r) \tag{3}$$

の解である．

この方程式の正則解の性質は，角変数と動径変数の分離を行なえば，たやすく明らかにされる．たとえばエネルギー E，角運動量 (lm) の固有解は関数

$$Y_l^m(\theta,\varphi)\frac{y_l(r)}{r}$$

であり，y_l は動径方程式（第9章 (20) を参照）

$$y_l''+\left[\varepsilon+\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^2}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]y_l = 0 \tag{4}$$

の解で，原点における値が0となるものである．ただし

$$\varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{5}$$

と置いている．

$E>0$ ならば，この解は無限遠において振動的な挙動を示し，どんな E に対しても固有解として許される．これは非束縛状態を表わし，電子－陽子の衝突におけるエネルギー E の定常状態をつくるときに現われる．

$E<0$ ならば，原点において正則な解の漸近式は指数関数 $e^{\kappa r}$ と $e^{-\kappa r}$ の線形結合であり，

$$\kappa = (-\varepsilon)^{1/2} = \frac{(-2mE)^{1/2}}{\hbar}. \tag{6}$$

この解が固有解として許されるのは，減少指数関数だけが現われるようないくつかの特別な値をEがとる場合だけである．これらのエネルギーは水素原子のとびとびのスペクトルに属するものであり，これに対応する波動関数はこの原子がとりうる束縛状態の一つを表わす．

本節の目標は水素原子の束縛状態を研究することである．この研究の結果は水素類似原子（He^+, Li^{++} など）にも容易に拡張される．そのときには陽子がもっと重い核に置き換えられる．この核の質量を M_A とし，陽子の質量を M_p とする．水素類似原子の換算質量

$$m' = \frac{m_e M_A}{m_e + M_A}$$

は，水素原子の換算質量

$$m = \frac{m_e M_p}{m_e + M_p}$$

とわずかに違う．他方，核の電荷を Ze とすれば，クーロン引力ポテンシャルは Ze^2/r で e^2/r ではない．m を m' に，e^2 を Ze^2 に置き換えれば，水素原子に関するすべての式は水素類似原子に適用される．

§ 3.　基底状態の束縛エネルギーの大きさの程度

この原子が基底状態にあるときの《半径》を r_0 で表わそう．この言葉の意味は，波動関数が事実上半径 r_0 の球の内部に全部集中していること，言いかえれば，電子が陽子から距離 r のところにある確率は $r > r_0$ のときわめて小さく，$r < r_0$ のとき無視できない値をとるということである．ごく大まかなモデルであるが，この確率密度の近似形として，半径 r_0 の球の内部における一様分布をとることができる．

明らかに，r_0 が小さくなるほどポテンシャル・エネルギーの平均値は（代数的な意味で）小さくなる．それは $(-e^2/r_0)$ 程度である．これに反して，運動エネルギーの平均値は r_0 が小さくなるほど大きくなる．実際，電子が半径 r_0 の球の内部に局在するならば，不確定性関係によってその運動量の値には下から限界が与えられる．すなわち運動量の標準偏差は $\hbar/r_0$ より小さくなることはできない．これから平均運動エネルギーは少なくとも $\hbar^2/2mr_0^2$ に等しくなる．それゆえ，全エネルギーは少なくともこれら二つの量の和

$$\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{e^2}{r_0}$$

に等しい．この値は $r_0 = \hbar^2/me^2$ のとき最小になる．この最小値

$$E_1 = -\frac{1}{2}\frac{me^4}{\hbar^2} \quad (= -13.5\,\mathrm{eV}) \tag{7}$$

は基底状態におけるエネルギーの大きさの程度であり，これに対応する半径の値

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (= 0.529 \times 10^{-8}\ \mathrm{cm}) \tag{8}$$

は基底状態における波動関数のひろがりの大きさの程度を与えるということが想像されよう．

偶然ではあるが——基底エネルギーは（7）によって厳密に与えられるということが示される．長さ a は**ボーア半径**または《水素原子の半径》と呼ばれている．

§ 4. 極座標によるシュレーディンガー方程式の解法

シュレーディンガー方程式を解くために，極座標へ移ろう．どんな中心力ポテンシャルの場合でも同じであるが，この座標系においては角変数と動径変数が分離され，問題は動径方程式（4）の正則解を求めることに帰着する．放物座標を使ってもシュレーディンガー方程式を解くことができる．それはこの座標系においてもまた二つの変数が分離されるからである．これはクーロン・ポテンシャルに特有の性質であるが，ここではそれを注意事項として指摘するにとどめ，極座標を使って問題を取り扱うことに限ろう．

変数の変換

$$x = 2\kappa r \tag{9}$$

を行なえば，方程式（4）は次元をもたないパラメータ

$$\nu = \frac{1}{\kappa a} = \frac{e^2}{\hbar c}\sqrt{\frac{mc^2}{-2E}} \tag{10}$$

だけを含む式になる．ここで κ と a はそれぞれ式（6）と（8）によって定められたものである．方程式（4）は方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\nu}{x} - \frac{1}{4}\right] y_l = 0 \tag{11}$$

と同値であり，y_l は原点において x^{l+1} のようになる解である．x がきわめて大きいとき，この解は指数関数的に増加するが，ν がいくつかの特殊な値をとる場合は例外であって，その場合には $\mathrm{e}^{-x/2}$ のように振舞う．われわれが求めたいのはこれらの特殊な ν の値と，それに対応する固有解である．

そのために関数の変換

$$y_l = x^{l+1} \mathrm{e}^{-x/2} v_l(x)$$

を行なえば，

$$\left[x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + (2l+2-x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - (l+1-\nu)\right] v_l = 0 \tag{12}$$

が得られる．この微分方程式はラプラスの微分方程式である（付録B，§1を参照）．この解のうち原点で有限なものは，定数倍を除いてただ一つしかなく，その他の解はいずれも原点で $(1/x)^{2l+1}$ の特異性を示す．上記の正則解は合流型超幾何級数

$$F(l+1-\nu|2l+2|x)\equiv\sum_{p=0}^{\infty}\frac{\Gamma(l+1+p-\nu)}{\Gamma(l+1-\nu)}\frac{(2l+1)!}{(2l+1+p)!}\frac{x^p}{p!} \tag{13}$$

である．

これを示すには，方程式（12）の解のうち原点におけるテイラー展開

$$v_l(x)=1+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_px^p+\cdots$$

によって表わされるものを求めればよい．この展開式を方程式（12）に代入すると，左辺は x のべき級数の形に書き表わされる．この展開の係数はすべて0でなければならないから，

$$\begin{aligned}(2l+2)a_1 &= (l+1-\nu)\\ 2(2l+3)a_2 &= (l+2-\nu)a_1\\ &\vdots\\ p(2l+1+p)a_p &= (l+p-\nu)a_{p-1}\end{aligned}$$

が得られ，これから

$$a_p=\frac{(p+l-\nu)(p-1+l-\nu)\cdots(1+l-\nu)}{(p+2l+1)(p-1+2l+1)\cdots(1+2l+1)}\times\frac{1}{p!}$$

が導き出される．a_p は確かに超幾何級数（13）における x^p の係数である．

一般に，級数（13）は無限級数であり，$x\to\infty$ のとき $x^{-l-1-\nu}e^x$ のように振舞う（付録B（9）―(11)）．したがって y_l は漸近区域において $x^{-\nu}e^{x/2}$ のように振舞い，固有値問題は解をもたない．

それにもかかわらず，ν がいくつかの特別な値をとるときには，ある番号から先の係数がすべて0になり，超幾何級数は多項式に縮まる．このことが起こるためには，$l+1-\nu$ が負の整数または0になること，すなわち

$$\nu=n=l+1+n' \qquad (n'=0,1,2,\cdots\infty) \tag{14}$$

が必要である．この場合には超幾何級数が n' 次の多項式に縮まり，動径関数が $x\to\infty$ のとき $x^ne^{-x/2}$ のように振舞い，シュレーディンガー方程式の解は固有解として許される．

それゆえ，量子化条件（14）によって，角運動量（lm）をもつ束縛状態のエネルギー準位が与えられる．その一つ一つが整数 n' の特殊値によって定められるのである．対応する束縛状態の波動関数は，動径解

$$y_l=x^{l+1}e^{-x/2}\sum_{p=0}^{n'}(-)^p\frac{n'!(2l+1)!}{(n'-p)!(2l+1+p)!p!}x^p \tag{15}$$

を使ってつくられる波動関数（これは規格化されていない）である．右辺の和によって表わされる n' 次の多項式は，定数を除けば，ラゲールの陪多項式 $L_{n'}^{2l+1}(x)$ である(*)．こ

(*)［訳注］単にラゲールの多項式と言ったり，ラゲールの同伴多項式またはソニンの多項式と言ったりする．

の定義と主な性質は付録B（§2）に与えられている．

§5. エネルギー・スペクトル．縮退

等式（14）のなかのパラメータνのところに，これをエネルギーの関数として表わした式（10）を代入すれば，角運動量lの状態のエネルギー・スペクトル

$$E_{ln'} = -\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{mc^2}{2(l+1+n')^2} \tag{16}$$

が得られる．n'すなわち動径量子数は，波動関数の動径部分の節の数に等しい．n'は0から$+\infty$までのあらゆる整数値をとることができるから，このスペクトルは可算無限個の準位の集合から成る．$n' \to +\infty$のとき，これらの準位は互いにだんだん接近し，極限において$E=0$という値に収束する．そしてここから連続スペクトルが始まる．

この状況は長い作用半径をもつポテンシャルに特有のものである．これに反して，球形の箱のように短い作用半径をもつポテンシャルは有限（場合によっては0）個の束縛状態を与える．まったく一般につぎのことが示される．ポテンシャルが負の値をとりながら漸近的に0に近づき，その収束が$1/r^2$より遅いとき，すなわち

$$r^2 V \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} -\infty$$

のときには，エネルギー準位の集合は可算無限である（そしてエネルギー0のところに集積点をもつ）．また，ポテンシャルが漸近的に$1/r^2$より速く0に近づくならば，準位の個数は有限——ときには0——である．

lのとりうるいろいろな値（$l=0,1,2,3,\cdots,\infty$）に対するスペクトルを全部あわせたものは，シュレーディンガーの理論による水素原子の全スペクトルを与える．それゆえ，この全スペクトルは（16）によって定められる数$E_{ln'}$の列から成り，lとn'は負でないすべての整数値をとりうるものである．この量が和$l+n'$だけで決まること，あるいは同じことであるが《主量子数》

$$n = l+n'+1$$

だけで決まることに注意しよう．これから

$$E_n = -\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{mc^2}{2n^2} \qquad (n=1,2,\cdots,\infty) \tag{17}$$

が得られる．

各エネルギーE_nに対して，言いかえれば整数nの一つに対して，角運動量は0から$n-1$までのすべての整数値をとることができる．したがって準位E_nの縮退は

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n(n-1)+n = n^2.$$

固有関数のn^2次元部分空間は，それぞれ定められた角運動量（lm）をもつ状態に対応

する n^2 個の関数によって張られ，《方位量子数》は n 個の値

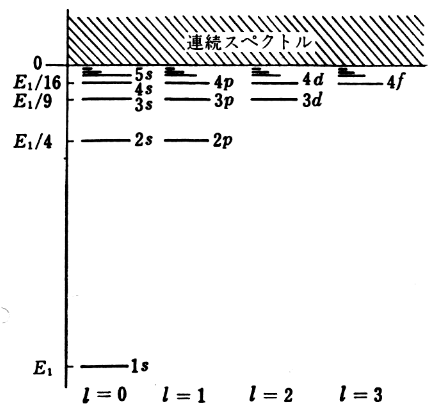
$$l = 0, 1, 2, \cdots, n-1$$

をとることができ，《磁気量子数》は $(2l+1)$ 個の値

$$m = -l, -l+1, \cdots, +l$$

をとることができる．

分光学における伝統的記法によれば，上に定めたいろいろな固有状態は正の整数 n とそのつぎにくる一つの文字 $(s, p, d, f, g, \cdots)$ によって表わされる．これらの文字は前章で説明した規約にしたがって l の値を示すものである．系の方向を示す量子数 m はわざわざあげない．たとえば，基底状態は 1s 状態である．最初の励起状態は 4 重に縮退しており，1 個の 2s 状態と 3 個の 2p 状態から成る．二番目の励起状態は 9 重に縮退しており，1 個の 3s 状態，3 個の 3p 状態，5 個の 3d 状態から成る．以下同様（11•1 図）．



11•1 図　水素原子のスペクトル

このスペクトルはさきに前期量子論が予想したものと同じである．これが実験から得られたスペクトルときわめてよく一致することはすでに指摘した．この理論によってスペクトル縞の位置はうまく説明されるが，これらの縞の微細構造は明らかにされない．本質的な欠陥はこれが非相対論的理論であるということである．準位の位置に対する相対論的効果は v^2/c^2 程度すなわち約 E_n/mc^2 である．それゆえ相対論による補正は 10^{-4} から 10^{-5} 程度である．他方，シュレーディンガーの理論は電子のスピンを考慮に入れていない．スピンは古典的な類似物をもたない内部自由度であって，これについては第13章で論じよう．水素原子の微細構造の分析は，第20章で電子の相対論的量子力学を解説する際にもう一度取りあげられるであろう．

§ 6.　束縛状態の固有関数

エネルギー準位 E_n に対応する固有関数は，線形独立な n^2 個の関数の線形結合である．§4 の研究によってわれわれには n^2 個の直交固有関数が与えられ，これらはそれぞれはっきり決まった角運動量の値に対応する．たとえば量子状態 (nlm) の波動関数は

$$\psi_{nlm} = a^{-3/2} N_{nl} F_{nl}\left(\frac{2r}{na}\right) Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{18}$$

と書かれる．ただし

$$F_{nl}(x) = x^l e^{-x/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(x). \tag{18'}$$

N_{nl} は規格化の定数である．ψ_{nlm} のノルムはラゲール多項式の母関数を使って計算される（付録 B，(15)）．

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+1)!]^3}} \tag{18''}$$

にとれば，このノルムは1に等しくなる．

量子状態（nlm）における r の各累乗の平均値を知ることは有益である．ここではその計算はしないでおこう（問題1）．結果は付録 B (§3) に与えられている．そのうち特に

$$\langle r\rangle_{nl} = \frac{1}{2}a(3n^2 - l(l+1)). \tag{19}$$

これにより，n が大きくなるにつれて電子は陽子から平均して遠ざかる．基底状態に対しては $\langle r\rangle_{1s} = 3a/2$ となり，§3の大まかな予想と一致する．

l が最大値（$n-1$）をとるときには波動関数が特に簡単な形をとる．それは $Y_l^m(\theta,\varphi)$ と動径関数

$$((2n)!)^{-1/2}\left(\frac{2}{na}\right)^{3/2}\left(\frac{2r}{na}\right)^{n-1} e^{-r/na}$$

との積である．この状態における r の平均値は

$$\langle r\rangle = \frac{1}{(2n)!}\left(\frac{2}{na}\right)^3\int_0^\infty\left(\frac{2r}{na}\right)^{2n-2} e^{-2r/na}\, r^3 dr = n\left(n+\frac{1}{2}\right)a$$

となり，さきに示したもっと一般の式と一致する．同じような計算で

$$\langle r^2\rangle = n^2\left(n+\frac{1}{2}\right)(n+1)a^2$$

が得られ，これから動径の標準偏差を表わす式

$$\Delta r = \sqrt{\langle r^2\rangle - \langle r\rangle^2} = \frac{1}{2}na\sqrt{2n+1} = \frac{\langle r\rangle}{\sqrt{2n+1}}$$

が導き出される．n がきわめて大きい値をとるとき，$\Delta r/\langle r\rangle$ はごく小さくなり，電子は事実上半径 n^2a の球面の近くに局在する．一方，この準位のエネルギーすなわち $-(1/2)e^2/n^2a$ は，半径 n^2a の円軌道を描く古典電子のエネルギーと同じである．

一般的な対応の規則によれば，量子数がきわめて大きくなった極限において古典運動法則が得られるはずであるが，上の特殊な例についてこの規則が確かめられる．量子論と古典理論を詳しく比較するには，波束の運動を検討することが必要であろう．ここではそれに立ち入らない．l が最大値（$l = n-1$）をとる状態は古典円軌道に対応することに注意するだけにしておく．この事実は前期量子論の結果と比較されるべきである．前期量子論によれば，量子化軌道の離心率は $\sqrt{1-(l^2/n^2)}$ に等しく，l が最大値をとるとき0になる（第1巻31頁を参照）．

II. クーロン散乱

§ 7. クーロン散乱波

重心を分離して相対座標に直してしまえば，クーロン相互作用をしている2粒子の衝突問題のシュレーディンガー方程式は，§1の記号を使って

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\frac{Z_1Z_2e^2}{r}\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{20}$$

と書かれる．Eは重心系におけるエネルギーである．散乱断面積は正のエネルギーに対する方程式 (20) の固有解の漸近的な挙動に関係する．ここで

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2 \tag{21}$$

$$\gamma = \frac{Z_1Z_2e^2}{\hbar v} \tag{22}$$

と置くと[1]，方程式 (20) はまた

$$\left(\Delta+k^2-\frac{2\gamma k}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{23}$$

と書かれる．

この方程式は

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}f(r-z) \tag{24}$$

という形の正則解をもつ．実際，この式を方程式 (23) に代入し，$u = r-z$ と置けば，微分方程式

$$\left[u\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}u^2}+(1-\mathrm{i}ku)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}-\gamma k\right]f(u) = 0$$

が得られ，さらに

$$v = \mathrm{i}ku = \mathrm{i}k(r-z)$$

と置けば，

$$\left[v\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}v^2}+(1-v)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}+\mathrm{i}\gamma\right]f(v) = 0$$

となる．これはラプラス型の方程式であり，この解のうち原点で正則なものは合流型超幾何級数 $F(-\mathrm{i}\gamma|1|v)$ である．それゆえシュレーディンガー方程式は確かに (24) の形をした正則解として関数

$$\psi_c = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}F(-\mathrm{i}\gamma|1|\mathrm{i}k(r-z)) \tag{25}$$

をもつ．Aは調整できる定数である．

---

(1) γは水素原子の問題において導入されたパラメータνに類似したものである．$a=\hbar^2/Z_1Z_2me^2$ と置くならば，$\gamma = 1/ka$ となる ((10) を参照).

付録B§1でなされた研究によれば，(25) に現われる超幾何級数は二つの関数の和で表わされ，$|v| = 2kr\sin^2(\theta/2)$ が大きな値をとるとき，それらの漸近式がそれぞれ付録Bの (10) と (11) で与えられる．付録Bの記号を採用し

$$\psi_i = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}W_1(-\mathrm{i}\gamma|1|\mathrm{i}ku) \tag{26}$$

$$\psi_d = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}W_2(-\mathrm{i}\gamma|1|\mathrm{i}ku) \tag{27}$$

と置くと，

$$\psi_c = \psi_i + \psi_d \tag{28}$$

を得る．関数 ψ_i と ψ_d は方程式 (20) の（正則でない）解である．

ここで

$$A = \Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)\mathrm{e}^{-\pi\gamma/2} \tag{29}$$

とすれば，ψ_i と ψ_d に対してつぎの漸近式が得られる．

$$\psi_i \underset{|r-z|\to\infty}{\sim} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kz+\gamma\log k(r-z))}\left[1+\frac{\gamma^2}{\mathrm{i}k(r-z)}+\cdots\right] \tag{30}$$

$$\psi_d \underset{|r-z|\to\infty}{\sim} -\frac{\gamma}{k(r-z)}\,\frac{\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)}{\Gamma(1-\mathrm{i}\gamma)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\gamma\log k(r-z))}\left[1+\frac{(1+\mathrm{i}\gamma)^2}{\mathrm{i}k(r-z)}+\cdots\right]. \tag{31}$$

$z = r\cos\theta$ であるから，ψ_d の漸近展開の初項はまた

$$\psi_d \underset{|r-z|\to\infty}{\sim} \frac{1}{r}\exp\left(\mathrm{i}(kr-\gamma\log 2kr)\right) f_c(\theta) \tag{32}$$

と書き表わされる．ただし

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta}\exp\left(-\mathrm{i}\gamma\log\left(\sin^2\frac{1}{2}\theta\right)+2\mathrm{i}\sigma_0\right) \tag{33}$$

$$\sigma_0 = \arg\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma). \tag{34}$$

§8. ラザフォードの公式

波 ψ_c は z 軸方向に入射運動量 $\hbar k$ をもつ1粒子の衝突の定常状態を表わす．ポテンシャルが $r\to\infty$ のとき少なくとも $1/r^2$ の速さで0に近づく場合には，同じ衝突の定常状態は漸近的に $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+f(\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}/r$ に近づく波動関数によって表わされることが知られている．この関数は入射平面波と散乱されて出てゆく波との和であると解釈される．同じように，波 ψ_c は二つの項 ψ_i, ψ_d の和の形に表わされ，それぞれの漸近式は平面波と出てゆく波に似ている．

しかしながら，原点から限りなく遠いところでも，ψ_i には因数 $\exp[\mathrm{i}\gamma\log k(r-z)]$ があるから，平面波と同じものとはみなされない．言いかえれば，クーロン場は漸近領域のなかまでも入射波に影響をおよぼすほど大きな有効距離をもつ．それにもかかわらず，負

のきわめて大きい z の値に対しては，ψ_i は密度1の波で，その流れの密度

$$j_i = \frac{\hbar}{2im}[\psi_i^*(\nabla\psi_i) - \psi_i(\nabla\psi_i)^*]$$

の向きは Oz 軸の方向で大きさは $v \equiv \hbar k/m$ に等しい（対数の項は $1/r$ 程度の補正を導入するが，これは無視できる）．このことにより，ψ_i が入射波であるという解釈が正当化される．

同様に，波 ψ_d の動径に対する変化も，r がきわめて大きい値をとるときでさえ，出てゆく波に特有な形 $\exp(\mathrm{i}kr)/r$ にはけっして近づかないで，もっと複雑な式 $\exp[\mathrm{i}(kr-\gamma\log 2kr)]/r$ に近づく．それにもかかわらず ψ_d は漸近領域で（入射波と散乱波への分離が意味をもたなくなる正の z 軸方向を除けば）確かに散乱波のような形をとる．なぜなら，この波から流れの密度 j_d を計算すると，確かに動径に平行で r の増す方向を向いており，因数 $\exp(-\mathrm{i}\gamma\log 2kr)$ の影響は $1/r$ の最低位に対して無視できるからである．このように近似的な意味で，波 ψ_d は密度 $|f_c(\theta)|^2/r^2$ の波であり流れの密度 $v|f_c(\theta)|^2/r^2$ をもつ．

立体角 $(\Omega, \Omega+\mathrm{d}\Omega)$ に散乱される流れの密度と入射する流れの密度の比をとれば，散乱の微分断面積

$$\sigma_c(\Omega) = |f_c(\theta)|^2 \tag{35}$$

が得られる．この公式は作用半径のもっと短いポテンシャルによる衝突について得た第10章の公式（2）に類似のものである．これについていま述べた証明は，第10章§3にある批判と同じ批判を招く．しかしもっと厳密な証明も第10章§4—6の証明をそのまま真似れば容易に行なわれる．

$f_c(\theta)$ はクーロン散乱の振幅と呼ばれる．その具体的な形は (33) によって与えられる．これからクーロン散乱の断面積を表わす式

$$\sigma_c(\Omega) = \frac{\gamma^2}{4k^2\sin^4\frac{1}{2}\theta} = \left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4E}\right)^2\sin^{-4}\frac{1}{2}\theta \tag{36}$$

が導き出される．ここに得られた厳密な式は，第6章で計算された古典クーロン散乱の断面積（第6章 (29)）と同じものになっている．それゆえ古典近似が正しくなくなったときでも，ラザフォードの古典的な公式はやはり成り立つ．このことは偶然と考えるべきである．

断面積の式 (36) について，つぎのようなクーロン散乱の顕著な性質が注目される：

i) それはただポテンシャルの絶対値だけで決まり，その符号にはよらない．

ii) 角に関する分布はエネルギーに無関係である．

iii) 与えられた角に対しては，エネルギーが増すとき，断面積は $1/E^2$ のように減少する．

iv) 全断面積は無限大である：$\int \sigma_c(\Omega)\,\mathrm{d}\Omega$ は小さい角のところで発散する．

この発散は純粋なクーロン場に特有のものである．自然界では，けっしてこのように純粋な場は見いだされない．たとえば，原子核による荷電粒子の散乱においては，核によるクーロン場は距離が増すにつれてこれを取り巻く電子の場によって徐々に中和され，距離が原子の半径にくらべて十分大きくなるとポテンシャルは0になる．この遮蔽効果は小さい角における散乱波の修正となって現われ，ここでの微分断面積が発散しなくなる．角度が $2\gamma/ka$ と $1/ka$（a は原子の半径）のどちらよりも大きいとき，この修正は無視できることが示される．核物理学で普通に用いられるエネルギーに対しては，この限界角はきわめて小さく，遮蔽効果をまったく無視することができる．

§ 9. 部分波への分解

シュレーディンガー方程式 (20) を，角変数と動径変数の分離によって解くこともできる．純粋なクーロン散乱を取り扱うときには，もっと直接的な方法を駆使できるから，上の方法は大きな利益をもたらさない．それに有効距離の長いポテンシャルを扱うので，散乱振幅 $f_c(\theta)$ の球面調和関数による展開の収束がきわめて緩慢であることがあらかじめわかっている．しかし部分波への分解は，本来の意味のクーロン相互作用に短い有効距離をもつ相互作用が付け加えられた問題に対していつでも有用である．なぜならこの補助的な相互作用があることによって影響を受けるのは，球面調和関数による振幅 $f(\theta)$ の展開式に現われる最初の数項だけであり，その結果 $f(\theta)-f_c(\theta)$ の展開ははやく収束するからである．

水素原子に関する角変数と動径変数の分離はすでに済ませてある．今の記号によると，方程式（4）は

$$y_l''+\left[k^2-\frac{2\gamma k}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]y_l=0 \tag{37}$$

と書かれる．

この方程式の解をつくるため，水素原子の問題を解いたときのように関数と変数の変換

$$y_l=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}(kr)^{l+1}v_l,\qquad \xi=-2\mathrm{i}kr \tag{38}$$

によって事を運ぶ．v_l はラプラスの方程式（(12) を参照）

$$\left[\xi\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}+(2l+2-\xi)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}-(l+1+\mathrm{i}\gamma)\right]v_l=0 \tag{39}$$

の解である．この方程式の正則でない二つの解 $W_{1,2}(l+1+\mathrm{i}\gamma|2l+2|\xi)$ の漸近展開は知られている（付録 B，(10)，(11)）．これから (39) の一般解の漸近式が導かれ，簡単な計算により，(37) の一般解の漸近式が導かれる．それは二つの指数関数

$$e^{\pm i(kr-\gamma\log 2kr)}$$

の線形結合である．

原点で正則な (39) の解は超幾何級数 $F(l+1+i\gamma|2l+2|\xi)$ であることが知られている．これは二つの関数 W_1 と W_2 の和である（付録B，(9)）．これに対応する方程式 (37) の解は漸近的に $\sin(kr-\gamma\log 2kr-l\pi/2+\sigma_l)$ の定数倍に近づき，

$$\sigma_l = \arg\Gamma(l+1+i\gamma) \tag{40}$$

である．σ_l はクーロンの位相のずれと呼ばれている．(37) の正則解を正則クーロン波 $F_l(\gamma;kr)$ であると定義する．この漸近式は

$$F_l \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr-\gamma\log 2kr-\frac{1}{2}l\pi+\sigma_l\right) \tag{41}$$

である．前に述べたことから

$$F_l(\gamma;kr) = c_l(\gamma)e^{ikr}(kr)^{l+1}F(l+1+i\gamma|2l+2|-2ikr) \tag{42}$$

であり，$c_l(\gamma)$ は F_l が (41) を満たすように調整される．すなわち

$$c_l = \frac{2^l e^{-\pi\gamma/2}|\Gamma(l+1+i\gamma)|}{(2l+1)!}. \tag{43}$$

F_l は実関数である．これはしばしば正則球面クーロン関数の名で呼ばれる．これは kr の関数でパラメータ γ によって決まる．

同様に《正則でない球面クーロン関数》も定義される．これらは原点において正則でない方程式 (37) の解である．通常最もよく利用されるものは付録B §5 で定義されている．ここでは出てゆく波と入ってくる波，$u_l^{(+)}$ と $u_l^{(-)}$ をあげるだけにしよう．これらの漸近式は

$$u_l^{(\pm)} \underset{r\to\infty}{\sim} e^{\pm i(kr-\gamma\log 2kr-l\pi/2)}.$$

これらの関数は互いに複素共役であり，

$$F_l = \mathrm{Im}\, e^{+i\sigma_l}u_l^{(+)} \tag{44}$$

である．

§ 10. 波 ψ_c の球面調和関数による展開

§7 で定義されたクーロン波

$$\psi_c \equiv e^{-\pi\gamma/2}\Gamma(1+i\gamma)\, e^{ikz}F(-i\gamma|1|ik(r-z)) \tag{45}$$

はルジャンドルの多項式による展開

$$\psi_c = \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{i\sigma_l}F_l(\gamma;kr)\,P_l(\cos\theta) \tag{46}$$

で表わされる．この展開は平面波の展開

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \tag{47}$$

に似ており，$\gamma \to 0$ の極限においてはこれと同じになる．

関係式 (46) を示すために，ψ_c の定義に現われる超幾何関数の積分表示（付録B，§6）を利用する．それによると

$$\psi_c = \frac{e^{-\pi\gamma/2}}{(1-e^{-2\pi\gamma})\Gamma(-i\gamma)} e^{ikz} \int_{\Gamma_0} e^{ik(r-z)t} t^{-i\gamma-1} (1-t)^{i\gamma} dt$$

$$= \frac{e^{-\pi\gamma/2}}{(1-e^{-2\pi\gamma})\Gamma(-i\gamma)} \int_{\Gamma_0} e^{ikrt} e^{ikz(1-t)} t^{-i\gamma-1} (1-t)^{i\gamma} dt.$$

積分記号のなかの指数関数 $\exp[ikz(1-t)]$ をルジャンドルの多項式の級数に展開し——(47) による——さらに和と積分の順序を入れかえると，

$$\psi_c = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l \varphi_l(r) P_l(\cos\theta) \tag{48}$$

となり，

$$\varphi_l(r) = \frac{e^{-\pi\gamma/2}}{(1-e^{-2\pi\gamma})\Gamma(-i\gamma)} \int_{\Gamma_0} e^{ikrt} j_l(kr(1-t)) t^{-i\gamma-1} (1-t)^{i\gamma} dt. \tag{49}$$

一方では

$$\xi j_l(\xi) = F_l(0;\xi) = \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \xi^{l+1} e^{i\xi} F(l+1|2l+2|-2i\xi),$$

すなわち

$$j_l(\xi) = 2^l \xi^l e^{i\xi} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(l+p)!}{(2l+1+p)!} \frac{(-2i\xi)^p}{p!}.$$

この式を (49) の右辺の積分のなかの j_l に代入し，もう一度和と積分の順序を交換すれば，

$$\varphi_l(r) = \frac{2^l e^{-\pi\gamma/2}}{(1-e^{-2\pi\gamma})\Gamma(-i\gamma)} (kr)^l e^{ikr}$$

$$\times \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(l+p)!}{(2l+1+p)!} \left(\int_{\Gamma_0} t^{-i\gamma-1} (1-t)^{l+p+i\gamma} dt \right) \frac{(-2ikr)^p}{p!}$$

となる．付録Bの（5）によれば

$$\int_{\Gamma_0} t^{-i\gamma-1} (1-t)^{l+p+i\gamma} dt = (1-e^{-2\pi\gamma}) \frac{\Gamma(-i\gamma)\Gamma(l+p+1+i\gamma)}{(l+p)!}$$

であるから，

$$\varphi_l(r) = 2^l e^{-\pi\gamma/2} (kr)^l e^{ikr} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\Gamma(l+p+1+i\gamma)}{(2l+1+p)!} \frac{(-2ikr)^p}{p!}$$

$$= 2^l e^{-\pi\gamma/2} \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{(2l+1)!} (kr)^l e^{ikr} F(l+1+i\gamma|2l+2|-2ikr).$$

定義 (40), (42), (43) を考えに入れると，これから

$$kr\varphi_l(r) = e^{i\sigma_l} F_l(\gamma; kr)$$

が出る．この式を等式 (48) に代入すれば，求める展開が得られる．

実はこの形の結果を予想することができたのである．事実，ψ_c はシュレーディンガー方程式 (20) の正則解であるから，$r\varphi_l(r)$ は必ず動径方程式 (37) の正則解であり，したがって $F_l(\gamma;kr)$ に比例するはずである．いま行なった計算の主な目的は，この比例定数を求めることにあった．

出てゆくクーロン波と入ってくるクーロン波によって展開 (46) を表わすのは有益である．F_l を $u_l^{(+)}$ と $u_l^{(-)}$ の関数として表わした式 (44) に置き換えると，

$$\psi_c = \frac{1}{2kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,\mathrm{i}^{l+1}(u_l^{(-)}-\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\sigma_l}u_l^{(+)})P_l(\cos\theta) \tag{50}$$

が得られる．

§ 11. 有効距離の短い相互作用によるクーロン・ポテンシャルの変形

クーロン場 $V_c(r)$ に有効距離の短い相互作用 $V'(r)$ が付け加えられたときには，衝突の定常状態はもはや純粋なクーロン波では表わされない．この状態を表わす波 ψ のルジャンドルの多項式による級数展開は

$$\psi = \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,\mathrm{i}^l\chi_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{51}$$

という形になる．

ポテンシャル $V'(r)$ による1粒子の散乱は位相のずれの方法によって取り扱われるが，この方法はポテンシャル $V'(r)+V_c(r)$ による散乱にもほとんどそのまま拡張される．実際には，各段階ごとに自由波をこれに相当するクーロン波に置き換えればよい．

関数 $\chi_l(r)$ は動径方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+k^2-\frac{2\gamma k}{r}-\frac{2m}{\hbar^2}V'-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r) = 0 \tag{52}$$

の解である．$V'(r)$ が少なくとも $1/r^2$ の速さで漸近的に0に近づくとき，この動径方程式の解は漸近的に指数関数

$$\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}(kr-\gamma\log 2kr)}$$

の線形結合に，あるいは同じことであるが，出てゆくクーロン関数と入ってくるクーロン関数 $u_l^{(+)}(r)$ と $u_l^{(-)}(r)$ の線形結合に近づくことが示される (問題2)．特にこの方程式の正則解は漸近的にこれら二つの関数のある線形結合に近づくが，この線形結合を

$$A_l(u_l^{(-)}-\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\sigma_l}u_l^{(+)})$$

とする．A_l は任意の定数である．位相のずれ δ_l はクーロン・ポテンシャルに付け加えられたポテンシャル $V'(r)$ を特徴づけるものである．これは $V'(r)=0$ のとき0となり，これが今後ひきつづいて演じる役割は，有効距離の短いポテンシャルによる散乱の理論で位相のずれが果たした役割に似ている．

動径方程式の正則解 χ_l は，波 ψ が衝突の定常状態を表わすように選ばなければならない．そのためには $\psi-\psi_c$ が漸近的には $e^{i(kr-\gamma\log 2kr)}/r$ の形をとり，純粋に出てゆく波のように振舞う必要がある．(50) と (51) をくらべれば容易にわかるように，この条件は $A_l=i/2$ のとき l のすべての値に対して満たされる．それゆえ漸近領域において——すなわち r の値が十分大きく $V'(r)$ が無視されるところで——ψ は展開

$$\begin{aligned}\psi &\underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{2kr}\sum_l (2l+1)\,i^{l+1}(u_l^{(-)}-e^{2i\delta_l}e^{2i\sigma_l}u_l^{(+)})\,P_l(\cos\theta)\\ &\underset{r\to\infty}{\sim} \psi_c-\frac{1}{2kr}\sum_l (2l+1)\,i^{l+1}e^{2i\sigma_l}(e^{2i\delta_l}-1)\,u_l^{(+)}P_l(\cos\theta)\end{aligned} \tag{53}$$

をもつ．§7 で行なったように，ψ は和

$$\psi=\psi_i+\psi_d \tag{54}$$

の形に書き表わされる．ここで ψ_i は (26) によって定義された関数であり，入射波を表わす．これに反して ψ_d は (27) によって定義された関数とは異なる．その漸近式は，計算の結果

$$\psi_d \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{r}\exp\,[i(kr-\gamma\log 2kr)]\,f(\theta)$$

と書かれる．ただし

$$f(\theta)=f_c(\theta)+f'(\theta) \tag{55}$$

$$f_c(\theta)=-\frac{\gamma}{2k\sin^2\theta/2}\exp\left[-i\gamma\log\left(\sin^2\frac{1}{2}\theta\right)+2i\sigma_0\right] \tag{55 a}$$

$$f'(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)\,e^{2i\sigma_l}(e^{2i\delta_l}-1)\,P_l(\cos\theta). \tag{55 b}$$

§8 でなされた議論と同じような議論によって容易に示されるように，散乱断面積は

$$\sigma(\Omega)=|f(\theta)|^2 \tag{56}$$

である．$f(\theta)$ を (55) によって置き換えれば，これを 3 項の和の形で書き表わすことができる．すなわち

$$\sigma(\Omega)=\sigma_c(\Omega)+2\,\mathrm{Re}\,f_c^*f'+|f'(\theta)|^2.$$

通常の位相のずれがもつ性質の多くは，ここに導入した位相のずれに大きな変更をしないでも適用される．特に，付加ポテンシャル $V'(r)$ の有効距離が短いほど，級数 (55b) は速く収束する．第10章§10 の諸公式 (39)—(44) は，関数 $u_l^{(\pm)}$ が自由波ではなくクーロン波を表わすものと考えれば，そのまま厳密に成り立つ (問題 3)．しかし，量 $\tau_l, v_l, q_l^{(+)}$ の数値は自由波に関する同じ量と非常に違う場合があるため，低エネルギーにおける挙動と級数の収束についての議論は，かなり深いところまで改めなければならない．特に，クーロン・ポテンシャルが斥力ポテンシャルであるとき，入射エネルギーが小さいほど侵入因子が小さくなり，$E\leq Z_1Z_2e^2/r_0$（点 $r=r_0$ におけるクーロン障壁の高さより

小さいエネルギー）になると，どんな l に対しても $v_l \ll 1$ となる．このことを除けば，散乱の共鳴の取り扱いはすべてそのまま繰り返される．公式に含まれる諸量の定義をいくらか変更すれば（問題4），ボルン近似の出発点である第10章の公式（72），（73）も，《有効距離》近似の出発点である第10章の公式（77）もそのまま成り立つ．

演習と問題

1. 水素原子の動径方程式を使って，漸化式（クラーマースの関係式）

$$\frac{s+1}{n^2}\langle r^s\rangle-(2s+1)a\langle r^{s-1}\rangle+\frac{s}{4}[(2l+1)^2-s^2]a^2\langle r^{s-2}\rangle = 0$$

を証明せよ．この式のなかの $\langle r^s\rangle$ は，原子が量子状態 (nlm) にあるときの r^s の平均値を表わす $(a > -2l-3)$．これから付録B§3で与えられる $\langle r^{-1}\rangle, \langle r\rangle, \langle r^2\rangle$ の式を導け［この関係式から $\langle r^{-2}\rangle$ を定めることはできない］．

水素類似原子の定常状態に対してはいつでも，運動エネルギーの平均値はエネルギーの固有値と〔大きさが〕等しく〔符号が〕反対である．すなわち

$$E_n = -\langle p^2/2m\rangle_{nlm}.$$

このことを示せ．

2. ポテンシャル $V(r) = Ze^2/r+V'(r)$ による質量 m の粒子の散乱を考え，$r\to\infty$ のとき $V'(r)$ は少なくとも $1/r^2$ の速さで0に近づくとする．動径方程式の解は漸近的に指数関数

$$\exp[\pm \mathrm{i}(kr-\gamma\log 2kr)]$$

の線形結合に近づくことを示せ（$k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $\gamma = Ze^2/\hbar v$；E と v は入射のエネルギーと速さ）．

3. 第10章（§10）において，有限な有効距離をもつポテンシャルにクーロン相互作用の項 $Z_1Z_2e^2/r$ を付け加えても，関数 $u_l^{(+)}$ と $u_l^{(-)}$ の定義に簡単な変更を加えれば，公式（39）から（44）まではそのまま成り立つことを示せ．

4. 散乱ポテンシャルが短い有効距離の項とクーロン相互作用の項の和であるとき，第10章の積分表示（72）と（73）はどのように修正する必要があるか．第10章（77）について同じ問題を考えよ．短い有効距離の項が56ページに述べた性質をもつとき，s 散乱に対して有効距離の理論を吟味せよ（H. A. Bethe，前掲論文，第10章の脚注 (20) を参照）．

第12章　調和振動子

§1. 序　説

古典力学において，調和振動子とは一つの軸に沿って動くように束縛され，この軸上に置かれた一点からの距離に比例する引力にしたがう一つの粒子をいう．これは解がよく知られている問題の典型である．力の中心を原点にとるとき，粒子の位置座標を q とし，その運動量を p，質量を m，引力を $-m\omega^2 q$ とする．この粒子の運動方程式はハミルトン関数 $(p^2+m^2\omega^2q^2)/2m$ から導き出される．容易に示されるように，この運動は原点のまわりで（角）振動数 ω をもつ正弦振動である．

これに対応する量子的問題は，質量 m をもつ粒子の1次元における問題であり，そのハミルトニアンは

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m}(p^2+m^2\omega^2q^2) \tag{1}$$

であり，位置の変数 q と運動量の変数 p は交換関係

$$[q, p] = i\hbar \tag{2}$$

によって結ばれている．これは特に簡単な量子系であり，そのシュレーディンガー方程式は厳密に解くことができる．これはまたいくつかの注目すべき性質をもっている．量子化された振動が関係する問題には，(1) の型のハミルトニアンがいつも入ってくるから，調和振動子の研究は量子論においてきわめて重要である．それは量子電気力学，もっと一般に場の量子論のなかに見いだされる．それはまた分子振動および結晶振動の理論にも見いだされる．他方，調和振動子に関する諸問題は，量子論の一般的原理と形式論についてすぐれた説明を与える．これらすべての理由により，この問題について本章で詳しく研究することは当を得ている．

初めの2節は1次元の振動子に当てられる．ハミルトニアンの固有値問題の一般解が第I節で与えられ，第II節はいろいろな応用に当てられる．すなわち，定常状態の母関数を定め，ハイゼンベルクの運動方程式を解き，古典振動と量子振動とを比較し，波束の運動を研究し——これは対応原理に対しても不確定性関係に対しても良い説明を与える——，そして最後に，熱力学的平衡にある調和振動子の集合がもついくつかの性質を調べる．

第III節は多次元の等方性調和振動子を取り扱う．この問題の本質的な特徴は縮退した固

有値の存在である．縮退から生じる諸結果は，２次元および３次元の等方性振動子という二つの特殊な場合について詳細に吟味される．

I．ハミルトニアンの固有状態と固有ベクトル

§2. 固有値問題

不要な定数で計算を繁雑にするのを避けるために，

$$\mathcal{H} = H\hbar\omega \qquad (3)$$

$$q = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} Q \qquad (4)$$

$$p = (m\hbar\omega)^{1/2} P \qquad (5)$$

と置く．われわれの問題は，演算子

$$H = \frac{1}{2}(P^2+Q^2) \qquad (6)$$

の固有値を求め，固有ベクトルをつくることである．ここで，エルミート演算子PとQは交換関係

$$[Q, P] = \mathrm{i} \qquad (7)$$

を満たす．

この問題を解決するために，一つの特殊な表現，たとえば表現 $\{Q\}$ を選び，この表現におけるシュレーディンガー方程式を解くという方法もある．このとき P は微分演算子 $(-\mathrm{id}/\mathrm{d}Q)$ で表わされるから，上の方程式は１次元のシュレーディンガー方程式

$$\frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}Q^2}+Q^2\right]u(Q) = \varepsilon u(Q) \qquad (8)$$

である．

われわれがここで採用する方法はディラックによるもので，もっと直接的な方法である．それはHの固有ベクトルのうちの一つに適当な演算子を適用することにより，それらのベクトルをつくり出す方法である．こうして特殊な表現を使わず，ヒルベルト空間の基本公理と交換関係（７）だけに基づいて，固有値問題の解決に到達する．ここに述べる方法はまた，この系の力学的状態がつくるベクトル空間 $\mathcal{E}$ を構成する方法とみなすこともでき，第８章§6に述べた方法と非常に似ていることがわかる．

§3. 演算子 $a, a^\dagger$ および N の導入

$$a = \frac{\sqrt{2}}{2}(Q+\mathrm{i}P) \qquad (9\,\mathrm{a})$$

$$a^\dagger = \frac{\sqrt{2}}{2}(Q - \mathrm{i}P) \tag{9 b}$$

と置こう．a と $a^\dagger$ は互いにエルミート共役である．交換関係（7）は

$$[a, a^\dagger] = 1 \tag{10}$$

と同値である．Q と P を a および $a^\dagger$ の関数として表わし，（6）に入れれば

$$H = \frac{1}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a) \tag{11}$$

を得る．ここで

$$N = a^\dagger a \tag{12}$$

と置こう．(10) と (11) から

$$H = N + \frac{1}{2} \tag{13}$$

が得られる．さらに (10) と (12) から重要な関係式

$$Na = a(N-1) \tag{14 a}$$

$$Na^\dagger = a^\dagger(N+1) \tag{14 b}$$

が導き出される．

われわれが解こうとしている固有値問題は，(12) によって定義された演算子 N の固有ベクトルをつくる問題と同値であり，(12) のなかの a と $a^\dagger$ は互いにエルミート共役な二つの演算子で，関係 (10) を満たすものである．

このために，われわれはつぎの重要な**定理**を証明しよう．

$|\nu\rangle$ が N の固有ベクトルで，ν はそれに対応する固有値であるとき，

i)　必ず $\nu \geq 0$.

ii)　$\nu = 0$ ならば $a|\nu\rangle = 0$，$\nu > 0$ ならば $a|\nu\rangle$ は 0 でないベクトルで，ノルム

$$\nu\langle\nu|\nu\rangle$$

をもち，固有値 $\nu-1$ に対応する N の固有ベクトルである．

iii)　$a^\dagger|\nu\rangle$ はいつでも 0 ではなく，ノルム

$$(\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle$$

をもち，固有値 $\nu+1$ に対応する N の固有ベクトルである．

仮定により，

$$N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle, \qquad \langle\nu|\nu\rangle > 0.$$

定義 (12) と関係 (10) を使って，これから $a|\nu\rangle$ と $a^\dagger|\nu\rangle$ のノルムを導き出せば，それぞれ

$$\langle\nu|a^\dagger a|\nu\rangle = \langle\nu|N|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle \tag{15 a}$$

$$\langle\nu|aa^\dagger|\nu\rangle = \langle\nu|(N+1)|\nu\rangle = (\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle. \tag{15 b}$$

ところで，ヒルベルト空間のベクトルのノルムは正または0で，ノルムが0になることはベクトルが0になるための必要十分条件である．この基本公理がここで満たされるためには，$\nu \geq 0$ の成り立つことが必要十分である（性質 i))[1]．$a|\nu\rangle$ が0になるための条件は式（15a）の特殊な場合である．他方，(14 a) と (14 b) によれば，

$$Na|\nu\rangle = a(N-1)|\nu\rangle = (\nu-1)a|\nu\rangle$$
$$Na^\dagger|\nu\rangle = a^\dagger(N+1)|\nu\rangle = (\nu+1)a^\dagger|\nu\rangle$$

であるから，$a|\nu\rangle$ と $a^\dagger|\nu\rangle$ は確かに上に述べた固有値方程式を満たす．　　(証明終)

§4.　Nのスペクトルと基底系

$\nu > 0$ ならば，上記の定理はまたベクトル $a|\nu\rangle$ にも適用されるが，その固有値は $\nu-1$ である．このことは $\nu \geq 1$ であることを保証する．$\nu > 1$ ならばこの定理はまたベクトル $a^2|\nu\rangle$ に適用される．こうしてつぎつぎに固有ベクトルの列

$$a|\nu\rangle,\ a^2|\nu\rangle,\ \cdots,\ a^p|\nu\rangle,\ \cdots$$

がつくられ，それぞれ固有値

$$\nu-1,\ \nu-2,\ \cdots,\ \nu-p,\ \cdots$$

に対応する．Nの固有値は0によって下から押さえられているから，この列は確かに有限個で終る．言いかえると，この列に現われるベクトルは，ある段階 $n+1$ から先はすべて0になる．すなわち，固有値 $\nu-n$ に対応する0でないベクトル $a^n|\nu\rangle$ に a が作用して0を生じる．前の ii) によって，このことから $\nu = n$ が要求される．

同じようにこの定理をベクトル $a^\dagger|\nu\rangle$ に適用することができる．$a^\dagger|\nu\rangle$ は確かに0でなく，固有値 $\nu+1$ に対応する．さらにベクトル $a^{\dagger 2}|\nu\rangle$ に適用し，以下同様である．こうしてつぎつぎに0でないベクトルの無限列

$$a^\dagger|\nu\rangle,\ a^{\dagger 2}|\nu\rangle,\ \cdots,\ a^{\dagger p}|\nu\rangle,\ \cdots$$

がつくられ，これらのベクトルはそれぞれ固有値

$$\nu+1,\ \nu+2,\ \cdots,\ \nu+p,\ \cdots$$

に対応するNの固有ベクトルである．

結論として，Nの固有値のスペクトルは負でない整数の列からつくられる．さらに，固有ベクトルのうちの一つに a または $a^\dagger$ を繰り返し作用させることによって，固有ベクトルの列が得られ，その一つ一つが上記のスペクトルに属する固有値の一つに対応する．各ベクトルとそのつぎのベクトルのノルムの比は関係式 (15 a) または (15 b) のいずれか一方によって与えられる．これらのベクトルの全体は完全系をつくる．事実，a と $a^\dagger$ の関数のうちNと交換するものは，すべてNの関数であることが示される (問題1)．した

(1)　第7章問題9を参照.

がって，Nはそれだけで交換するオブザーバブルの完全集合を構成し，その固有値は一つも縮退していない．

こうしてつくられたベクトルは1に規格化されていない．オブザーバブルNの直交規格化基底系をつくるためには，これらの一つ一つに適当な定数を掛ければよい．その定数は関係式（15a）と（15b）から容易に導き出される．この定数は任意の位相を除いて定められるが，いろいろな公式ができるだけ簡単な形をとるように位相を固定しよう．たとえば，Nの固有値

$$0,\ 1,\ \cdots,\ n,\ \cdots$$

にそれぞれ対応する直交規格化ベクトルの列

$$|0\rangle,\ |1\rangle,\ \cdots,\ |n\rangle,\ \cdots \tag{16}$$

をつくる．これらは漸化式

$$a^\dagger|n\rangle=(n+1)^{1/2}|n+1\rangle \tag{17}$$

$$a|n\rangle=n^{1/2}|n-1\rangle \qquad (n\neq 0) \tag{18}$$

$$a|0\rangle=0 \tag{19}$$

によって一方から他方が導き出される．容易に確かめられるように，これらはすべてベクトル $|0\rangle$ から関係式

$$|n\rangle=(n!)^{-1/2}a^{\dagger n}|0\rangle \tag{20}$$

によって導き出され，確かに固有値方程式

$$N|n\rangle=n|n\rangle \tag{21}$$

にしたがい，これらのノルムも事実1に等しく，その結果関係式

$$\langle n|n'\rangle=\delta_{nn'} \tag{22}$$

を満たす．

Nはこれだけで一つの完全集合をつくるから，ベクトルの列（16）は，ここで調べている量子系のすべての力学的状態から成る空間 $\mathcal{E}$ において，$\mathcal{E}$ のベクトルの完全系を構成する．残されているのは，このような $\mathcal{E}$ の構成の内部的な一貫性を確かめることである．すなわち $\mathcal{E}$ のベクトルがヒルベルト空間のベクトルを特徴づける諸公理を満たすことと，この系に結びついた物理的な量が適当な代数的関係を満たすオブザーバブルであることを確かめなければならない．ここではこれらの厳密な論点には立ち入らないでおこう（問題3）．

§5. 表　現　$\{N\}$

列（16）に属するベクトルの全体は，ある一つの表現の基底系をつくる．われわれはこの表現を表現 $\{N\}$ と呼ぶ．(17)，(18)，(19)，(21) から，この表現において演算子N，

$a, a^\dagger$ を表わす行列が容易に導かれる．便宜上，この行列の行と列を量子数 n の増す順に並べる（一番上の行が $n=0$ に対応し，つぎの行が $n=1$ に対応する，など；左端の列が $n=0$ に対応し，つぎの列が $n=1$ に対応する，など）ことにすると，Nを表わすのは対角行列

$$N=\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & & \\ \vdots & 0 & 2 & 0 & \\ \vdots & & 0 & 3 & 0 \\ \vdots & & & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

である．a を表わすのは実行列

$$a=\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & & & \\ \vdots & 0 & 0 & \sqrt{3} & & \\ \vdots & & 0 & 0 & \sqrt{4} & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

で，0 でない要素が現われるのは，主対角線のすぐ上にある対角線だけである．また $a^\dagger$ を表わすのは a のエルミート共役行列

$$a^\dagger=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & & \\ \vdots & & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & \sqrt{4} & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

であって，0 でない要素が現われるのは，主対角線のすぐ下にある対角線だけである．この量子系のオブザーバブルはすべて a と $a^\dagger$ の関数であるから，表現 $\{N\}$ においてこれらを表わす行列は容易につくられる．特に，

$$\mathscr{H}=\left(N+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{23}$$

$$q=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(a^\dagger+a) \tag{24}$$

$$p=\mathrm{i}\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{1/2}(a^\dagger-a) \tag{25}$$

が得られる．$\mathscr{H}$ はこの表現において対角型であり，その固有値は

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n=0,1,2,\cdots,\infty)$$

である．q と p は a と $a^\dagger$ の線形関数であり，0 でない要素が現われるのは，主対角線の両隣りにある対角線だけである．これらの行列をつくることは読者に委ねよう．

§6.　生成演算子と消滅演算子

演算子 $N, a^\dagger, a$ は固有値問題の解法を容易にするために導入されたものである．$\mathcal{H}$ が1次元の量子的粒子のハミルトニアンであるときには，これらの演算子は直接の物理的意味をまったくもたない．

しかし $\mathcal{H}$ の固有値問題について一つの違った解釈をすることができる．実際，エネルギー準位は幅 $\hbar\omega$ の等間隔にあるから，$\mathcal{H}$ を互いに区別されない多粒子の系のハミルトニアンと考え，これらの粒子はすべて同じエネルギー $\hbar\omega$ をもつ状態にあり，その個数 N が変わりうるものとみなすこともできる．$\mathcal{H}$ の各固有状態ははっきり決まった N の値に対応し，その結果，系全体のエネルギーの決まった値に対応する．たとえばベクトル $|n\rangle$ は n 個の粒子から成る状態を表わす．ベクトル $|0\rangle$ は空虚な状態であり，これに対する粒子の数は0である．状態 $|n\rangle$ から状態 $|n+1\rangle$ に移ると，粒子の数は1だけ増し，系の全エネルギーは大きさ $\hbar\omega$ だけ増大する．空虚な状態のエネルギーが0ではなく $\hbar\omega/2$ に等しいことに注意しよう．この不合理を避けるには，系のエネルギーを定める演算子として $\mathcal{H}$ ではなく，$\mathcal{H}-\hbar\omega/2$ をとればよい．

この解釈によれば，演算子 N は粒子の数を表わし，0から $+\infty$ までのすべての整数値をとることができる．演算子 $a^\dagger$ は n 個の粒子から成る状態を $(n+1)$ 個の粒子から成る状態に変換する．$a^\dagger$ は**生成演算子**である．これとは逆に，演算子 a は現にある粒子の個数を一つだけ減らす．a は**消滅演算子**である．

調和振動子のこのような解釈は，場の量子論や結晶および分子振動論で一般に利用される．たとえば，電磁場は平面波を重ね合わせた形に表わされ，各平面波は偏光の方向 $\boldsymbol{\varepsilon}$ と波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ によって特徴づけられる．それぞれの振動数は $\omega = k/c$ である．古典論では各成分の強さが連続的に変わりうるが，実際は光量子すなわちエネルギー $\hbar\omega$ をもつ光子によって変化する．量子化された電磁場のハミルトニアンはいくつかの項の重ね合わせであり，各項は $\boldsymbol{\varepsilon}$ と $\boldsymbol{k}$ によって特徴づけられた特殊な型の光子に関係する（われわれは添字 s を使って組 $(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{k})$ を表わす）．すなわち

$$\mathrm{H} = \sum_s \mathcal{H}_s.$$

おのおのの部分ハミルトニアン $\mathcal{H}_s$ は

$$\mathcal{H}_s = \hbar\omega_s a_s^\dagger a_s$$

の形に書き表わされる．演算子 a_s と $a_s^\dagger$ は互いにエルミート共役であり，交換関係

$$[a_s, a_{s'}^\dagger] = \delta_{ss'}$$

を満たす．これは関係 (10) の簡単な一般化である．演算子 $a_s^\dagger$ と a_s はそれぞれ s 型光子の生成および消滅演算子と解釈される（第21章を参照）．

§ 7. 表現 $\{Q\}$．エルミート多項式

波動力学の言葉で言うと，$\mathcal{H}$ の固有値問題とは方程式

$$\mathcal{H}\psi(q) \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2}+\frac{1}{2}m\omega^2q^2\right)\psi(q) = E\psi(q)$$

が，区間 $(-\infty, +\infty)$ の両端で正則な解をもつように，E の値を定めることである．この問題に第3章（§10）の議論をあてはめると，上の条件を満たす E の値はとびとびのスペクトルをつくり，その一つ一つにただ一つの（定数を除いて定まる）解が対応することを確かめることができる．さらに上記の解は有限のノルムをもつ．このことは先に述べた研究とうまく一致する．それによれば，$\mathcal{H}$ のスペクトルは完全にとびとびで，縮退がないのであった．このように言い表わした固有値問題を解くことによっても，$\mathcal{H}$ の固有値の列

$$\frac{1}{2}\hbar\omega,\ \frac{3}{2}\hbar\omega,\ \cdots,\ \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ \cdots$$

がもう一度得られよう．これに対応する固有関数 $\psi_n(q) \equiv \langle q|n\rangle$ は，表現 $\{q\}$ において固有状態 $|n\rangle$ を表わす関数である．

これからは，表現 $\{q\}$ から変数変換（4）によって導き出された表現 $\{Q\}$ を採用する．同じ固有状態 $|n\rangle$ をそれぞれ表現 $\{Q\}$ と $\{q\}$ において表わす固有関数 $u_n(Q)$ と $\psi_n(q)$ は，明らかに関係

$$\langle Q|n\rangle \equiv u_n(Q) = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/4}\psi_n(q)$$

によって結ばれる．方程式（8）は（定数 $\hbar\omega$ を除くと）表現 $\{Q\}$ におけるシュレーディンガー方程式である．

固有関数 $u_0(Q), u_1(Q), \cdots, u_n(Q), \cdots$ は関係 (17)—(19) を使って容易に得られる．基底状態の固有関数は方程式 (19)，すなわち

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}+Q\right]u_0(Q) = 0$$

を満たし，1に規格化された解は

$$u_0(Q) = \pi^{-1/4}\mathrm{e}^{-Q^2/2} \tag{26}$$

である．(17) と (18) から，隣りあう固有値に関する規格化固有関数のあいだの関係が得られる（付録B，第Ⅲ節を参照）．特に，(17) を繰り返し適用することにより，関数 u_0 から出発してすべての固有関数をつくることができる．(17) を使うよりもむしろこれに同値な関係 (20) を使うこともまた同じように許され，その結果

$$u_n(Q) = [\pi^{1/2}2^n(n!)]^{-1/2}\left(Q-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)^n\mathrm{e}^{-Q^2/2} \tag{27}$$

が得られる．

演算子のあいだの恒等式

$$\left(Q-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)\equiv\left(-\mathrm{e}^{Q^2/2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\mathrm{e}^{-Q^2/2}\right)$$

を利用すれば，等式 (27) を付録B (70) の形に書き表わすこともできる．この式のなかの $H_n(Q)$ は，定義（付録B (59)）によると n 次のエルミート多項式である．それゆえ $u_n(Q)$ は n 次のエルミート多項式に $\exp(-Q^2/2)$ を掛け，符号 $(-)^n$ をつけたものである．これらの多項式の主な性質は付録B (§7) に述べられている．

II．応用といろいろな性質

§8.　固有関数 $u_n(Q)$ の母関数

応用として，関数 $u_n(Q)$ の母関数すなわち

$$F(t,Q)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n u_n(Q)t^n$$

となるような関数 $F(t,Q)$ を定めてみよう．ただし c_n は適当な規格化の定数とする．$u_n(Q)$ はベクトル $(n!)^{-1/2}a^{\dagger n}|0\rangle$ を表わす（式 (20)）から，$F(t,Q)$ を Q の関数と考えれば，これはベクトル

$$\sum_n\frac{c_n}{(n!)^{1/2}}(a^\dagger t)^n|0\rangle$$

を表わす．c_n を

$$c_n=\frac{1}{(n!)^{1/2}}$$

に選べば，$F(t,Q)$ はベクトル $\exp(a^\dagger t)|0\rangle$ を表わす．すなわち

$$F(t,Q)=\langle Q|\exp(a^\dagger t)|0\rangle. \tag{28}$$

この最後の式を計算するために，つぎの補助定理を利用しよう．

補助定理． 二つの演算子 A, B の交換子がそのおのおのと交換するとき，すなわち

$$[A,[A,B]]=[B,[A,B]]=0$$

であるとき，等式

$$\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B\mathrm{e}^{-[A,B]/2} \tag{29}$$

が成り立つ．

ここで述べる証明はグラウバーによるものである．

パラメータ x に依存する演算子

$$f(x)=\mathrm{e}^{Ax}\mathrm{e}^{Bx}$$

を考える．これに対して

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}=A\mathrm{e}^{Ax}\mathrm{e}^{Bx}+\mathrm{e}^{Ax}B\mathrm{e}^{Bx}=(A+\mathrm{e}^{Ax}B\mathrm{e}^{-Ax})f(x)$$

が成り立つ．ところが $[B, A]$ は A と交換するから，

$$[B, A^n]=nA^{n-1}[B, A]$$

$$[B, \mathrm{e}^{-Ax}]=\sum_n(-)^n\frac{x^n}{n!}[B, A^n]=\sum_n(-)^n\frac{x^n}{(n-1)!}A^{n-1}[B, A]$$
$$=-\mathrm{e}^{-Ax}[B, A]x.$$

それゆえ（第8章，問題4を参照）

$$\mathrm{e}^{Ax}B\mathrm{e}^{-Ax}=B-[B, A]x.$$

したがって

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}=(A+B+[A, B]x)f(x).$$

$f(x)$ はこの微分方程式の解で，$f(0)=1$ となるものである．ところで演算子 $(A+B)$ と $[B, A]$ は交換するから，ここでは普通の代数の量のように考えることができる．この微分方程式は容易に積分され，

$$f(x)=\exp((A+B)x)\exp\left(\frac{1}{2}[A, B]x^2\right)$$

（証明終）

が得られる．ここで $x=1$ と置けば，等式 (29) が出てくる．

$A=Qt/\sqrt{2}$，$B=-\mathrm{i}Pt/\sqrt{2}$ にとれば $[A, B]=t^2/2$ である．このとき等式 (29) を演算子 $\mathrm{e}^{a^\dagger t}$ に適用すれば，

$$\exp(a^\dagger t)=\exp[Qt/\sqrt{2}]\exp[-\mathrm{i}Pt/\sqrt{2}]\exp\left(-\frac{1}{4}t^2\right).$$

この式を等式 (28) に代入すれば，

$$F(t, Q)=\exp\left(-\frac{1}{4}t^2\right)\exp[Qt/\sqrt{2}]\langle Q|\exp[-\mathrm{i}Pt/\sqrt{2}]|0\rangle$$

となるが，ここで(*)

(*) ［訳注］ α を定数とするとき，演算子

$$\exp\left(\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\equiv\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\alpha^n\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}$$

を x^m に施すと

$$\exp\left(\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)x^m=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\alpha^n\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}x^m=\sum_{n=0}^{m}\frac{\alpha^n}{n!}m(m-1)\cdots(m-n+1)x^{m-n}$$

$$=\sum_{n=0}^{m}\frac{m!}{n!(m-n)!}\alpha^nx^{m-n}=(x+\alpha)^m$$

となって，x を $x+\alpha$ に置き換えるのと同等である．したがって x のべき級数に展開できるような関数 $f(x)$ に対しては，その展開の各項の x をすべて $x+\alpha$ に置き換えることになるので

$$\exp\left(\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)f(x)=f(x+\alpha).$$

$$\langle Q|\exp[-\mathrm{i}Pt/\sqrt{2}]|0\rangle = \exp\left(-\frac{t}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)u_0(Q) = u_0\left(Q-\frac{t}{\sqrt{2}}\right).$$

u_0 を表わす式 (26) によって計算した結果は,

$$F(t, Q) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u_n(Q)}{(n!)^{1/2}} t^n = \pi^{-1/4}\exp\left(-\frac{1}{2}Q^2+\sqrt{2}tQ-\frac{1}{2}t^2\right) \tag{30}$$

となる.

§ 9. ハイゼンベルク方程式の積分

調和振動子をハイゼンベルク表示で考えよう. この§9に現われる演算子はすべてハイゼンベルク表示の演算子である. それゆえ, 第8章の議論では, これらに対応するシュレーディンガー表示の演算子と区別できるように, 添字Hを用いたけれども, ここではそれを省略する. これらの演算子は時間とともに変化する. これらが初期時刻 $t=0$ においてとる値には, 添字0をつける.

等式 (23) と関係式 (14) を考えに入れると, 演算子 a と $a^\dagger$ のハイゼンベルク方程式はそれぞれ

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = [a, \mathscr{H}] = \hbar\omega a, \qquad \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a^\dagger}{\mathrm{d}t} = [a^\dagger, \mathscr{H}] = -\hbar\omega a^\dagger$$

と書かれる. これらの方程式は容易に積分され,

$$a(t) = a_0 e^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{31 a}$$

$$a^\dagger(t) = a_0^\dagger e^{+\mathrm{i}\omega t} \tag{31 b}$$

を得る.

q および p を a と $a^\dagger$ の関数として表わした式 (24) と (25) を使えば,

$$q(t) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(a_0^\dagger e^{\mathrm{i}\omega t}+a_0 e^{-\mathrm{i}\omega t}) \tag{32}$$

$$p(t) = \mathrm{i}\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{1/2}(a_0^\dagger e^{\mathrm{i}\omega t}-a_0 e^{-\mathrm{i}\omega t}) \tag{33}$$

となる. a_0 および $a_0^\dagger$ を初期位置 q_0 と初期運動量 p_0 の関数として表わし, 上の等式に代入すれば,

$$q(t) = q_0\cos\omega t+\frac{1}{m\omega}p_0\sin\omega t \tag{34}$$

$$p(t) = p_0\cos\omega t-m\omega q_0\sin\omega t \tag{35}$$

となる. ここに見いだされるのは古典調和振動子の場合と同じ正弦関数である. 特に, 平均値 $\langle q\rangle_t, \langle p\rangle_t$ は古典運動の法則

$$\langle q\rangle_t = \langle q\rangle_0\cos\omega t+\frac{1}{m\omega}\langle p\rangle_0\sin\omega t \tag{36}$$

$$\langle p\rangle_t = \langle p\rangle_0 \cos\omega t - m\omega\langle q\rangle_0 \sin\omega t \tag{37}$$

にしたがう．調和振動子のこのような性質はすでに第6章で指摘したものである．

§ 10. 古典振動子と量子振動子

古典力学と量子力学とのあいだの対応を明らかにするため，この§10とつぎの§11では古典振動子の運動をそれに対応する量子振動子の運動と比較しよう．

古典調和振動子の運動方程式の一般解は

$$q_{\mathrm{cl.}} = A\sin(\omega t+\varphi), \qquad p_{\mathrm{cl.}} = m\omega A\cos(\omega t+\varphi)$$

と書かれる．これは（角）振動数 ω の単振動であり，二つのパラメータ A と φ によって決まる．振動子のエネルギーは関係

$$E_{\mathrm{cl.}} = \frac{m\omega^2 A^2}{2} \tag{38}$$

によって振幅 A に結びつけられる．エネルギー $E_{\mathrm{cl.}}$ を固定するとき，起こりうるいろいろな運動は位相のずれ φ によって互いに区別される．

この系の力学変数の一つを $F_{\mathrm{cl.}}$ とする．これは $q_{\mathrm{cl.}}$ と $p_{\mathrm{cl.}}$ の関数 $F(q_{\mathrm{cl.}}(t), p_{\mathrm{cl.}}(t))$ であるから，時間の経過とともに周期的に（しかし必ずしも正弦曲線的にではなく）変化し，その振動数は ω である．同じエネルギーをもつ二つの運動に対する $F_{\mathrm{cl.}}$ の変化の法則は，位相のずれを除けば同じである．同じエネルギーをもつすべての運動（ミクロカノニカル集合(*)）に関する $F_{\mathrm{cl.}}$ の平均 $\overline{F_{\mathrm{cl.}}}$ を得るには，位相について平均すればよい．$\overline{F_{\mathrm{cl.}}}$ は時刻に無関係であり，これらの運動のうちのどれか一つがたどる時間的経過のなかで，$F_{\mathrm{cl.}}$ のとる値を1周期 $2\pi/\omega$ にわたって平均しても得られる．特に，

$$\bar{q}_{\mathrm{cl.}} = \bar{p}_{\mathrm{cl.}} = 0 \tag{39}$$

$$\overline{q^2_{\mathrm{cl.}}} = \frac{A^2}{2} = \frac{E_{\mathrm{cl.}}}{m\omega^2} \tag{40}$$

$$\overline{p^2_{\mathrm{cl.}}} = m^2\omega^2\overline{q^2_{\mathrm{cl.}}} = mE_{\mathrm{cl.}} \tag{41}$$

（一つの振動子の平均運動エネルギーと平均ポテンシャル・エネルギーは等しい）．

このことと，定常状態にある量子振動子の挙動とがどのように比較されるかを見よう．状態 $|n\rangle$ において，量子振動子は明確で時間的に一定なエネルギー $(n+1/2)\hbar\omega = E_n$

(*)［訳注］第8章，第VI節（第1巻280頁）で述べられているように，量子系の力学的状態が完全には知られていないときには，統計的混合を考えねばならない．これは，考えている系と同一で，力学的状態の異なるものを多数（統計集合）想定し，それについての平均をとって実測と比較することを意味する．系について，エネルギーの値だけしか知られていないときには，そのエネルギー（あるいはその値を含む微小な幅のなかのエネルギー値）をもつすべての状態を同じ重みで含むような統計集合を用いる．これをミクロカノニカル集合または定エネルギー集合と呼ぶ．

をもつ．これに反して位置のオブザーバブル q と運動量のオブザーバブル p ははっきりした値をもたない．われわれが定めることのできるのは，これらの量の一方あるいは他方の測定がたまたま行なわれた場合に測定結果のとる値の統計的分布だけである．状態は定常的であるから，これらの統計的分布は時間的に一定である．特に，q の平均と p の平均は，表現 $\{N\}$ におけるオブザーバブル q と p の n 番目の対角要素(*)にそれぞれ等しい．すなわち

$$\langle n|q|n\rangle = \langle n|p|n\rangle = 0. \tag{42}$$

q^2 と p^2 の平均値は，これらの演算子を a と $a^\dagger$ の関数として表わし（式 (24)，(25))，関係 (17)—(19) を使えば容易に計算される．その結果は

$$\langle n|q^2|n\rangle = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\langle n|(a^\dagger a+aa^\dagger)|n\rangle = \frac{E_n}{m\omega^2} \tag{43}$$

$$\langle n|p^2|n\rangle = \frac{1}{2}m\hbar\omega\langle n|(a^\dagger a+aa^\dagger)|n\rangle = mE_n \tag{44}$$

のようになる．対応原理が要求するところによれば，$n\to\infty$ となる極限において，平均値の式 (42)—(44) は，同じエネルギーの値 ($E_n = E_{\rm cl.}$) に対する古典的な式 (39)—(41) とそれぞれ一致しなければならない（問題 4 を参照)．この一致が n のすべての値に対して，たとえ小さい値に対してさえも厳密に成り立つという事実は，調和振動子に特有の性質である．

ついでながら，状態 $|n\rangle$ においては

$$\varDelta p\cdot\varDelta q = \frac{E_n}{\omega} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar \tag{45}$$

であり，位置－運動量不確定性関係が満たされていることを注意しておく．

§ 11.　最小波束の運動と古典的極限

1 次元の波束

$$f(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle p\rangle q-\frac{m\omega}{2\hbar}(q-\langle q\rangle)^2\right] \tag{46}$$

を考えよう．これは最小波束（第 4 章問題 4）である．すなわち，これによって表わされる一つの粒子は，配置空間のなかでは平均位置 $\langle q\rangle$ のまわりに標準偏差 $\varDelta q = (\hbar/2m\omega)^{1/2}$ で局在し，運動量空間のなかでは平均位置 $\langle p\rangle$ のまわりに標準偏差 $\varDelta p = (\hbar m\omega/2)^{1/2}$ で局在する．

この粒子がハミルトニアン $\mathscr{H}$ にしたがうならば，このような波束は時間の経過のなかで最小の大きさを保ち，振動数 ω で振動することが示される（問題 6）．もっと詳しく言

(*) [訳注]　N の固有ベクトルは $|0\rangle$ からはじまるから，第 $n+1$ 行，第 $n+1$ 列の要素である．

えば，q の統計的分布 $\rho(q,t)$ は法則

$$\rho(q,t) \equiv |f(q,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}(q-\langle q\rangle_t)^2\right]$$

にしたがって変化する．これは形を変えずに振動し，その中心 $\langle q\rangle_t$ は古典理論から予想されるとおり調和振動を行なう．p の統計的分布も同じような挙動を示す．

これに反して $\mathscr{H}$ の統計的分布は時間的に一定である． この系を $(n+1/2)\hbar\omega$ というエネルギーの状態に見いだす確率はどの瞬間においても

$$e^{-E_{\rm cl.}/\hbar\omega}\frac{(E_{\rm cl.}/\hbar\omega)^n}{n!}$$

に等しい（問題6）．ここで記号

$$E_{\rm cl.} = \frac{1}{2m}(\langle p\rangle^2+m^2\omega^2\langle q\rangle^2)$$

を用いている．上の確率法則から容易にエネルギーの平均値

$$\langle E\rangle = e^{-E_{\rm cl.}/\hbar\omega}\sum_{n=0}^{\infty}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\frac{(E_{\rm cl.}/\hbar\omega)^n}{n!} = E_{\rm cl.}+\frac{1}{2}\hbar\omega \tag{47}$$

および標準偏差

$$\Delta E = \sqrt{\langle\mathscr{H}^2\rangle-\langle\mathscr{H}\rangle^2} = \sqrt{\hbar\omega E_{\rm cl.}} \tag{48}$$

が導かれる．

この波束は不確定性関係に関する良い説明を与える．

これは偏差の積 $\Delta p\cdot\Delta q$ がつねに最小値 $\hbar/2$ を保つように選ばれている．

時間－エネルギー関係に関する問題において，われわれが ΔE と比較しうるものは，q の統計的分布の変化のリズムを特徴づける時間 τ_q である．τ_q は分布の中心 $\langle q\rangle_t$ が分布のひろがり Δq に等しい大きさを移動するために必要な時間である． 波束の中心の速度は $\langle p\rangle_t/m$ であるから，

$$\tau_q = \frac{m}{\langle p\rangle_t}\Delta q = \frac{1}{\langle p\rangle_t}(\hbar m/2\omega)^{1/2}$$

を得る．

$\langle p\rangle_t$ がその最大値 $(2mE_{\rm cl.})^{1/2}$ に到達するごとに，τ_q は周期的にその最小値をとる．そのとき，

$$\tau_{q\,\rm min.} = \frac{1}{2}\hbar\left(\frac{1}{\hbar\omega E_{\rm cl.}}\right)^{1/2}.$$

(48) により，

$$\tau_{q\,\rm min.}\,\Delta E = \frac{1}{2}\hbar \tag{49}$$

となり，時間－エネルギー不確定性関係（第8章 (47)）に合致する．

波束の中心の振幅 A は古典関係式 (38) によって与えられる．すなわち

$$A = (2E_{\mathrm{cl.}}/m\omega^2)^{1/2}.$$

この振幅が波束のひろがり $(\hbar/2m\omega)^{1/2}$ にくらべてはるかに大きい極限では，$(\hbar/2m\omega)^{1/2}$ 程度の長さは無視できるとみなす限り，法則 $\langle q\rangle_t$ にしたがって振動する点状の粒子という古典像は，この現象について満足すべき記述を与える．この極限は，対応原理が要求するように，ちょうど量子数がきわめて大きい場合になっている．事実，これが成り立つのは $E_{\mathrm{cl.}} \gg \hbar\omega$ のときである．ところで，この波束の構成に加わった量子化エネルギーの状態のうち，特に目立ったものの個数は，偏差 ΔE と準位間の距離 $\hbar\omega$ との比の程度である．すなわち

$$\frac{\Delta E}{\hbar\omega} = \left(\frac{E_{\mathrm{cl.}}}{\hbar\omega}\right)^{1/2} \gg 1.$$

もちろん，この古典像はまた運動量の散らばり $\Delta p = (\hbar m\omega/2)^{1/2}$ とエネルギーの散らばり $\Delta E = (\hbar\omega E_{\mathrm{cl.}})^{1/2}$ を無視できる量として取り扱うことを前提にしている．特にエネルギーに関しては，このようなスケールの精度で $\langle E\rangle \simeq E_{\mathrm{cl.}}$ が成り立つ．実際，

$$\langle E\rangle - E_{\mathrm{cl.}} = \frac{1}{2}\hbar\omega \ll \Delta E.$$

この系に対応する古典粒子のエネルギー $E_{\mathrm{cl.}}$ をこの系に与えることが，こうしてうまく正当化される．

§ 12. 熱力学的平衡にある調和振動子

温度 T の恒温装置によって熱力学的平衡にある調和振動子を考えよう．その力学的状態は純粋な状態ではなく，ボルツマンの法則にしたがい，密度演算子

$$\rho = \frac{\exp(-\mathcal{H}/kT)}{\mathrm{Tr}\exp(-\mathcal{H}/kT)} \tag{50}$$

によって表わされる統計的混合である(*)．この混合の性質をいくつか調べよう．

まず状態和

$$Z(\mu) = \mathrm{Tr}\exp(-\mu\mathcal{H})$$

を計算しよう．この跡の計算は，$\mathcal{H}$ を対角型にする表現を使うと容易に行なわれる．すなわち

$$Z(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty}\exp\left[-\mu\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right] = \mathrm{e}^{-\mu\hbar\omega/2}\sum_{n=0}^{\infty}(\mathrm{e}^{-\mu\hbar\omega})^n.$$

ここで右辺の等比級数の和をとれば，

$$Z(\mu) = \frac{\mathrm{e}^{-\mu\hbar\omega/2}}{1-\mathrm{e}^{-\mu\hbar\omega}}. \tag{51}$$

(*) [訳注] さきのミクロカノニカル集合に対し，このような密度演算子で規定される統計集合をカノニカル集合と言う．

平均エネルギー

$$\langle E\rangle \equiv \mathrm{Tr}\,\rho\mathcal{H}$$

は，第8章（84）を適用して状態和から導き出される．すなわち

$$\log Z = -\frac{1}{2}\mu\hbar\omega - \log(1-\mathrm{e}^{-\mu\hbar\omega})$$

から

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial(\log Z)}{\partial\mu}\bigg|_{\mu=1/kT} = \frac{1}{2}\hbar\omega\coth\frac{\hbar\omega}{2kT} = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\hbar\omega/kT}-1}. \qquad (52)$$

量子化振動子の平均エネルギーについてのプランクの公式が（定数 $\hbar\omega/2$ を別にして）もう一度得られた．

きわめて低い温度（$kT \ll \hbar\omega$）のとき，振動子はほとんど確実に基底状態に見いだされる：

$$\langle E\rangle \simeq \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

きわめて高い温度（$kT \gg \hbar\omega$）のとき，平均エネルギーは，マクスウェル=ボルツマンの古典統計力学によって与えられたエネルギーに近づく：

$$\langle E\rangle \simeq kT.$$

熱力学的平衡にある量子振動子の性質のうち，F. ブロッホによる定理を最後にあげておく．

定理．位置と運動量の線形結合 $\alpha q+\beta p$ を与えるとき，その確率法則はガウスの法則である．

この定理を証明するために，上に述べた確率法則の特性関数 $\varphi(\xi)$ を計算する．定義によれば，$\varphi(\xi)$ は $\exp[\mathrm{i}\xi(\alpha q+\beta p)]$ の平均値

$$\varphi(\xi) = \mathrm{Tr}\,\rho\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi(\alpha q+\beta p)} \qquad (53)$$

である．

この跡を表現 $\{N\}$ において計算しよう．ここでは ρ が対角型である．

まず

$$g_n(\xi) = \langle n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi(\alpha q+\beta p)}|n\rangle \qquad (54)$$

という量を計算する．

$$\gamma = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(\alpha - \mathrm{i}m\omega\beta)$$

と置けば，

$$\alpha q+\beta p = \gamma a+\gamma^* a^\dagger$$

となる（式（24），（25））．等式（29）により，

$$\exp[\mathrm{i}\xi(\alpha q+\beta p)] = \exp[\mathrm{i}\xi(\gamma a+\gamma^* a^\dagger)]$$

$$= \exp\left(\frac{1}{2}\xi^2\gamma\gamma^*\right)\exp(\mathrm{i}\xi\gamma a)\exp(\mathrm{i}\xi\gamma^* a^\dagger).$$

これから

$$g_n(\xi) = \exp\left(\frac{1}{2}\xi^2\gamma\gamma^*\right)\langle n|\exp(\mathrm{i}\xi\gamma a)\exp(\mathrm{i}\xi\gamma^* a^\dagger)|n\rangle.$$

指数関数を展開し，関係式 (17) を考えに入れると，

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\gamma^* a^\dagger}|n\rangle = \sum_{t=0}^{\infty}\left(\frac{(n+t)!}{n!}\right)^{1/2}\frac{(\mathrm{i}\xi\gamma^*)^t}{t!}|n+t\rangle$$

$$\langle n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\gamma a} = \sum_{s=0}^{\infty}\left(\frac{(n+s)!}{n!}\right)^{1/2}\frac{(\mathrm{i}\xi\gamma)^s}{s!}\langle n+s|$$

を得る．これら二つのベクトルの内積をとるとき，二重和に現われる項のうち番号の異なるもの ($s\neq t$) の積は直交関係によりすべて 0 となる．そこで結局

$$g_n(\xi) = \mathrm{e}^{\xi^2\gamma\gamma^*/2}\sum_{s=0}^{\infty}\frac{(-\xi^2\gamma\gamma^*)^s}{(s!)^2}\frac{(n+s)!}{n!}. \tag{55}$$

ここで

$$x = -\xi^2\gamma\gamma^*, \qquad y = \mathrm{e}^{-\hbar\omega/kT} \tag{56}$$

と置く．表現 $\{N\}$ において ρ は対角型であり，その n 番目の対角要素は

$$\rho_n \equiv \langle n|\rho|n\rangle = \frac{\mathrm{e}^{-(n+1/2)\hbar\omega/kT}}{Z(1/kT)} = (1-y)y^n \tag{57}$$

に等しい．(53)—(57) から

$$\varphi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty}\rho_n g_n(\xi) = (1-y)\mathrm{e}^{-x/2}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty}\frac{(n+s)!}{n!(s!)^2}x^s y^n$$

が導き出される．この二重級数の和は正確に求められる．まず第一に，n に関する和は級数展開

$$\frac{1}{(1-y)^{s+1}} = 1+(s+1)y+\frac{(s+1)(s+2)}{2!}y^2+\cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(s+n)!}{s!\,n!}y^n$$

から得られる．それゆえ

$$\varphi(\xi) = \mathrm{e}^{-x/2}\sum_s\frac{1}{s!}\left(\frac{x}{1-y}\right)^s = \exp\left[x\left(\frac{1}{1-y}-\frac{1}{2}\right)\right].$$

x と y の定め方を考えに入れると，この式は

$$\varphi(\xi) = \mathrm{e}^{-\sigma\xi^2/2} \tag{58}$$

と書かれる．ただし

$$\sigma = \gamma\gamma^*\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \tag{59}$$

である．この分布の特性関数がガウスの関数であるから，確率法則も同じくガウスの関数である．すなわち，標準偏差の二乗が σ になるようなガウスの法則である． (証明終)

III. 多次元等方性調和振動子

§ 13. p 次元等方性振動子の一般的な取り扱い

p 次元等方性調和振動子というのは，ハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{p} \mathcal{H}_i \tag{60}$$

$$\mathcal{H}_i = \frac{1}{2m}(p_i^2 + m^2\omega^2 q_i^2) \tag{61}$$

をもつ p 次元の系である．

変数の組 (p_1, q_1) に関する力学的状態がつくる空間を $\mathcal{E}_1$，変数の組 (p_2, q_2) に関する力学的状態がつくる空間を $\mathcal{E}_2$，以下同様とする．問題になっている系の力学的状態がつくる空間 $\mathcal{E}$ は，空間 $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \cdots, \mathcal{E}_p$ のテンソル積

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{E}_p \tag{62}$$

である．

ハミルトニアン $\mathcal{H}_i$ を空間 $\mathcal{E}_i$ の演算子とみなしたとき，その固有ベクトルを $|n_i\rangle$ (i は固定，$n_i = 0, 1, \cdots, \infty$) で表わす．これらは $\mathcal{E}_i$ における完全直交規格化系をつくる．今後はいつもこれらの相対的な位相を適当に選んで，i 型の変数に関する消滅および生成演算子で書かれた関係式 (17)—(20) が満たされていると仮定する．それぞれ空間 $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \cdots, \mathcal{E}_p$ に属する p 個のベクトルのテンソル積によってつくられたベクトル

$$|n_1 n_2 \cdots n_p\rangle \equiv |n_1\rangle |n_2\rangle \cdots |n_p\rangle \tag{63}$$

$$(n_1 = 0, 1, \cdots, \infty\,;\ n_2 = 0, 1, \cdots, \infty\,;\ \cdots\,;\ n_p = 0, 1, \cdots, \infty)$$

は，$\mathcal{E}$ における完全直交規格化系をつくる[2]．明らかにこれらのベクトルは $\mathcal{H}$ の固有ベクトルである．さらに，

$$\mathcal{H}_1 |n_1\rangle = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega |n_1\rangle$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$\mathcal{H}_p |n_p\rangle = \left(n_p + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega |n_p\rangle$$

であるから，

$$\mathcal{H} |n_1 \cdots n_p\rangle \equiv (\mathcal{H}_1 + \cdots + \mathcal{H}_p) |n_1 \cdots n_p\rangle = \left(n_1 + \cdots + n_p + \frac{1}{2}p\right)\hbar\omega |n_1 \cdots n_p\rangle$$

が得られる．こうして首尾よくつくられた $\mathcal{H}$ の基底系に属するベクトルは，p 個の量子

---

(2) 表現 $\{q\} \equiv \{q_1 q_2 \cdots q_p\}$ において，ベクトル $|n_1 n_2 \cdots n_p\rangle$ は積

$$\langle q_1|n_1\rangle\langle q_2|n_2\rangle \cdots \langle q_p|n_p\rangle \equiv \psi_{n_1}(q_1)\psi_{n_2}(q_2)\cdots\psi_{n_p}(q_p)$$

によって表わされる．

数 $n_1, n_2, \cdots, n_p$ によって目じるしがつけられ，各量子数は0から $+\infty$ までのすべての整数値をとることができる．一方，対応する固有エネルギー

$$\left(n_1+\cdots+n_p+\frac{1}{2}p\right)\hbar\omega$$

はこれら p 個の数の和

$$n = n_1+n_2+\cdots+n_p$$

だけによって決まる．n の整数値 ($\geqslant 0$) が一つ与えられたとき，数列 $n_1, n_2, \cdots, n_p$ がとりうる値のうち異なるものの個数は

$$_{n+p-1}C_n \equiv \frac{(n+p-1)\,!}{n\,!\,(p-1)\,!} \tag{64}$$

である．したがって固有値 $(n+p/2)\hbar\omega$ は $_{n+p-1}C_n$ 重に縮退している[3]．

i 型の量子の消滅および生成演算子

$$\begin{aligned} a_i &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} q_i+\mathrm{i}\,(2m\hbar\omega)^{-1/2}\,p_i \\ a_i^\dagger &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} q_i-\mathrm{i}\,(2m\hbar\omega)^{-1/2}\,p_i \end{aligned} \tag{65}$$

を導入しよう．これらは交換関係（式(10)）

$$\begin{aligned} [a_i, a_j] &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \\ [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij} \end{aligned} \qquad (i, j = 1, \cdots, p) \tag{66}$$

を満たす．前に与えたベクトル $|n_i\rangle$ の定義により，ベクトル $|n_1 \cdots n_p\rangle$ についても関係 (17)—(20) を一般化した関係が成り立つ．特に，基底状態の固有ベクトルを $|0\rangle$ で表わす，すなわち

$$|0\rangle \equiv |\overbrace{0\cdots0}^{p\text{個}}\rangle$$

とすれば，

$$a_1|0\rangle = a_2|0\rangle = \cdots = a_p|0\rangle = 0 \tag{67}$$

$$|n_1 \cdots n_p\rangle = (n_1! \cdots n_p!)^{-1/2} a_1^{\dagger n_1} \cdots a_p^{\dagger n_p}|0\rangle \tag{68}$$

と書くことができる．

オブザーバブル

$$N_i \equiv a_i^\dagger a_i \qquad (i = 1, 2, \cdots, p) \tag{69}$$

はそれぞれスペクトルとして負でない整数の列をもつ．これらはそれぞれ1型，2型，…p 型の量子の個数と解釈される．それらの和

---

(3) 実際，p 個の整数 $\geqslant 0$ の列 $(n_1, n_2, \cdots, n_p)$ で和が n に等しいものの個数は，p 個もののから<u>重複を許して</u> n 個をとる<u>組合せ</u>の総数と同じである．

$$N \equiv \sum_{i=1}^{p} N_i$$

は量子の総数である．そして

$$\mathscr{H} = \left(N + \frac{1}{2}p\right)\hbar\omega$$

が成り立つ．明らかに $N_1, N_2, \cdots, N_p$ は交換するオブザーバブルの完全集合をつくり，それらの基底系は，ちょうどいまつくったばかりの $\mathscr{H}$ の基底系になっている．

完全集合をつくる運動の定数が N_i だけでないことは明瞭である．$a_i a_j^\dagger$ の形の演算子はすべて $\mathscr{H}$ と交換する．この型の演算子とそれらの共役演算子の線形結合により，全部で p^2 個の独立なエルミート演算子をつくることができる．これら p^2 個の運動の定数の関数のなかに，交換するオブザーバブルの完全集合がいくつか存在する．$p=2$ と $p=3$ という二つの特殊な場合についてこの点を明らかにしよう．

§ 14. 2次元等方性振動子

これはハミルトニアン

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m}(p_1^2 + m^2\omega^2 q_1^2) + \frac{1}{2m}(p_2^2 + m^2\omega^2 q_2^2)$$

をもつ2次元の系である．前の§13の研究はこの特殊な場合にも適用される．下の表に示したのは $\mathscr{H}$ の固有値（第1列）とその縮退の位数（第2列），および N_1 と N_2 に共通な固有ベクトルのうちから，各固有値に対する部分空間を張る列を選んだもの（第3列）である．

$\hbar\omega$	1	$\lvert 00\rangle$	
$2\hbar\omega$	2	$\lvert 10\rangle, \lvert 01\rangle$	
$3\hbar\omega$	3	$\lvert 20\rangle, \lvert 11\rangle, \lvert 02\rangle$	(70)
....	......	....	
$(n+1)\hbar\omega$	$n+1$	$\lvert n\,0\rangle, \lvert n-1\,1\rangle, \cdots, \lvert n-s\,s\rangle, \cdots \lvert 0\,n\rangle$	
....	......	....	

《角運動量》演算子 L は

$$L \equiv \frac{1}{\hbar}(q_1 p_2 - q_2 p_1) = \mathrm{i}(a_1 a_2^\dagger - a_1^\dagger a_2) \tag{71}$$

によって定義され，これは運動の定数である．NとLにより，交換するオブザーバブルの完全集合がもう一つつくられることを示そう．そのために，演算子

$$A_\pm = \frac{\sqrt{2}}{2}(a_1 \mp \mathrm{i}a_2), \qquad A_\pm^\dagger = \frac{\sqrt{2}}{2}(a_1^\dagger \pm \mathrm{i}a_2^\dagger) \tag{72}$$

を導入する．これらの演算子は，a と $a^\dagger$ とのあいだの関係（66）と同じ交換関係を満た

す．すなわち

$$[A_r, A_s] = [A_r^\dagger, A_s^\dagger] = 0 \qquad (r = + \text{ または } -,\ s = + \text{ または } -). \quad (73)$$
$$[A_r, A_s^\dagger] = \delta_{rs}$$

これにより A_+ と $A_+^\dagger$ を＋型の量子の消滅および生成演算子と解釈し，A_- と $A_-^\dagger$ を－型の量子の消滅および生成演算子と解釈することができる．この解釈によれば，演算子

$$N_+ \equiv A_+^\dagger A_+ \qquad \text{および} \qquad N_- \equiv A_-^\dagger A_- \quad (74)$$

はそれぞれ《＋量子》と《－量子》の個数を表わす．交換関係 (73) は関係 (66) と同じものであるから，N_+ と N_- に共通な固有ベクトルをつくる問題は，数学的には N_1 と N_2 に共通な固有ベクトルをつくる問題と同じである．したがって N_+ と N_- はスペクトルとしてそれぞれ負でない整数の列

$$n_+ = 0, 1, 2, \cdots, \qquad n_- = 0, 1, 2, \cdots$$

をもち，これら二つのオブザーバブルは交換するオブザーバブルの完全集合をつくる．量子数の組 (n_+, n_-) の一つ一つに対応して，共通の固有ベクトルが（定数を除いて）ただ一つ定まる．さらに，関係式 (67) から

$$A_+|00\rangle = A_-|00\rangle = 0 \quad (75)$$

が出てくる．それゆえ表 (70) のベクトル $|00\rangle$ は基底状態 $(n_+ = n_- = 0)$ の固有ベクトルである．ベクトル

$$|n_+n_-\rangle \equiv (n_+!\,n_-!)^{-1/2} A_+^{\dagger n_+} A_-^{\dagger n_-} |00\rangle \quad (76)$$

は完全直交規格化列をつくり，それぞれ N_+ と N_- に共通の固有ベクトルである．つまり

$$N_+|n_+n_-\rangle = n_+|n_+n_-\rangle, \qquad N_-|n_+n_-\rangle = n_-|n_+n_-\rangle.$$

さて，N と L を A および $A^\dagger$ の関数として表わせば，計算の結果は

$$N = N_+ + N_-, \qquad L = N_+ - N_-$$

となる．オブザーバブル N_+ と N_- は交換するオブザーバブルの完全集合をつくるから，それらの和 N と差 L も同じ性質をもつ．これが証明しようと思ったことである．

結論として，われわれは $\mathcal{H}$ の固有ベクトルの完全直交規格化列をもう一組手に入れたことになる．すなわちベクトル $|n_+n_-\rangle$ の列である．これらは固有値方程式

$$\mathcal{H}|n_+n_-\rangle = (n_+ + n_- + 1)\,\hbar\omega\,|n_+n_-\rangle \quad (77)$$
$$L|n_+n_-\rangle = (n_+ - n_-)|n_+n_-\rangle \quad (78)$$

を満たす．

L と A および $A^\dagger$ の交換関係を調べよう．簡単な計算によって，

$$[L, A_\pm^\dagger] = \pm A_\pm^\dagger \quad (79)$$
$$[L, A_\pm] = \mp A_\pm \quad (80)$$

が得られる．したがって，L の固有ベクトルに作用するとき，$A_+^\dagger$ と A_- は L〔の固有値〕

を1だけ増し，$A_-^\dagger$ と A_+ は1だけ減らす．このことはいろいろな形に解釈される．荷電場の量子論において，場が2次元の等方性振動子の集まりとして表わされるとき，N_+ は正の電荷をもつ粒子の個数，N_- は負の電荷をもつ粒子の個数であり，L は（定数を除いて）全電荷である．この解釈によれば，$A_+^\dagger$ は正の電荷を一つつくり出し，A_- は負の電荷を一つ吸収し，その結果どちらも電荷を1だけ増す．同じようにして $A_-^\dagger$ と A_+ は電荷を1だけ減らす．

結晶振動の理論においても，格子の振動は2次元の等方性振動子の集まりによって表わされる．振動の量子はフォノンと呼ばれる．1型と2型のフォノンによる表現は定常波による分類を表わす．＋型と－型のフォノンによる表現は進行波に対応し，これらは二つの方向のうちの一方に《伝わる》．結晶格子による（中性子，X線などの）散乱問題において，計算を最も簡単にするのは進行波による表現である．

§15.　3次元等方性振動子

3次元の等方性調和振動子とは，中心からの距離の二乗に比例する中心力ポテンシャルのなかにある1粒子である．そのハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\boldsymbol{r}^2. \tag{81}$$

$\mathcal{H}$ は3項の和である．すなわち

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_y + \mathcal{H}_z \\ \mathcal{H}_i &= \frac{1}{2m}(p_i^2 + m\omega^2 r_i^2) \qquad (i = x, y, z). \end{aligned} \tag{82}$$

§13の研究によれば，$\mathcal{H}$ の固有値は式

$$\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots, \infty) \tag{83}$$

によって与えられ，$(n+1)(n+2)/2$ 重に縮退している．オブザーバブル N_x, N_y, N_z は運動の定数の完全集合をつくり，これらの基底系に属する固有ベクトル $|n_x n_y n_z\rangle$ は，対応する三つの固有値 n_x, n_y, n_z によって目じるしがつけられる．これらのベクトルは式

$$|n_x n_y n_z\rangle = (n_x!\, n_y!\, n_z!)^{-1/2} a_x^{\dagger n_x} a_y^{\dagger n_y} a_z^{\dagger n_z} |000\rangle \tag{84}$$

によって基底ベクトル $|000\rangle$ から導かれ，基底ベクトル自体は三つの等式

$$a_x|000\rangle = a_y|000\rangle = a_z|000\rangle = 0 \tag{85}$$

により（定数を除いて）定められる．

角運動量

$$\boldsymbol{l} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

を導入しよう．中心力ポテンシャルのハミルトニアンがもつよく知られた性質（第9章）

により，$\mathscr{H}, l^2, l_z$ もまた交換するオブザーバブルの完全集合をつくる．これら三つのオブザーバブルに共通な固有ベクトル $|nlm\rangle$ は三つの量子数 n, l, m によって目じるしがつけられ，このベクトルに対応する $\mathscr{H}, l^2, l_z$ の固有値はそれぞれ $(n+3/2)\hbar\omega,\ l(l+1)\hbar^2,\ m\hbar$ である．ベクトル $|nlm\rangle$ の全体は $\mathscr{H}$ の固有ベクトルから成る完全直交規格化系をつくる．それらはベクトル $|n_xn_yn_z\rangle$ の系からユニタリ変換によって導き出される．ここでは，これらのベクトルの具体的な構成は示さないことにしよう(4)．われわれは量子数 nを固定したとき l と m がとりうる値，言いかえれば各エネルギー準位に対応して起こりうる角運動量の異なる状態を決定するだけにしよう．

ここに現われた演算子 l_z と前の§14 の演算子 L とは非常に似ているから，同じような変数変換が念頭に浮かぶ．そこで

$$A_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}[a_x - \mathrm{i}a_y], \qquad A_0 = a_z, \qquad A_{-1} = \frac{\sqrt{2}}{2}[a_x + \mathrm{i}a_y] \tag{86}$$

によって定められる演算子 A_m $(m = 1, 0, -1)$ とそのエルミート共役演算子 $A_m^\dagger$ を導入しよう．A_m と $A_m^\dagger$ は関係 (73) と同じような交換関係を満たし，それぞれ m 型量子の消滅および生成演算子と解釈される．m 型量子の個数は演算子 $N_m = A_m^\dagger A_m$ によって表わされる．明らかに，N_1, N_0, N_{-1} は交換するオブザーバブルの完全集合をつくり，

$$\mathscr{H} = \left(N_1 + N_0 + N_{-1} + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \qquad N = N_1 + N_0 + N_{-1}$$

が成り立つ．三つの固有値の組 (n_1, n_0, n_{-1}) の一つ一つに対応して，これら三つのオブザーバブルに共通な固有ベクトル，すなわちベクトル

$$|n_1 n_0 n_{-1}\rangle = (n_1!\, n_0!\, n_{-1}!)^{-1/2} A_1^{\dagger n_1} A_0^{\dagger n_0} A_{-1}^{\dagger n_{-1}} |000\rangle$$

が定まる．これらのベクトルの全体は $\mathscr{H}$ の固有ベクトルから成る完全系をつくる．また，

$$\mathscr{H}|n_1 n_0 n_{-1}\rangle = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega\,|n_1 n_0 n_{-1}\rangle, \qquad n = n_1 + n_0 + n_{-1}$$

が得られる．

いまつくったベクトルは一般に l^2 の固有ベクトルにはなっていないが，l_z の固有ベクトルにはなっている．なぜなら

---

(4) 表現 $\{r\}$ において，$|n_xn_yn_z\rangle$ は波動関数 $\phi_{n_x}(x)\phi_{n_y}(y)\phi_{n_z}(z)$ によって表わされる．$|nlm\rangle$ は関数

$$\Psi_{nlm}(r) \equiv \frac{y_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi)$$

によって表わされる．ただし $y_{nl}(r)$ は微分方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right] y_{nl} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega y_{nl}$$

の解で，原点において 0 となる——そして無限遠においては正則な——ものである．

$$l_z = (N_1 - N_{-1})\hbar \tag{87}$$

となるからである．それゆえ

$$m = n_1 - n_{-1}. \tag{88}$$

$\mathscr{H}$ の固有値 $(n+3/2)\hbar\omega$ に対する固有ベクトルが張る部分空間を考える．これを張る $(n+1)(n+2)/2$ 個のベクトル $|n_1n_0n_{-1}\rangle$ $(n_1+n_0+n_{-1}=n)$ は，l_z の固有ベクトルから成り，この部分空間における完全直交規格化列をつくる．(88) により，量子数 m は $-n$ から $+n$ までの整数値をすべてとりうる．これらの m の値の一つ一つに対して，線形独立なベクトルの個数 c_m を決定することは容易である．その結果はつぎの表によって与えられる：

$$\begin{array}{lcccccccc} |m| = n & n-1 & n-2 & \cdots & n-2s & n-(2s+1) & n-(2s+2) & \cdots \\ c_m = 1 & 1 & 2 & \cdots & s+1 & s+1 & s+2 & \cdots. \end{array} \tag{89}$$

ところで，角運動量の性質により，l^2 の各固有値に対し，すなわち l の値の一つ一つに対して，はっきり決まった角運動量 (lm) をもつ $(2l+1)$ 個のベクトルから成る列がいくつか定まる．各列ごとに m は $-l$ と $+l$ のあいだに含まれる $(2l+1)$ 個の整数値をとる．この列の数を d_l とする．明らかに

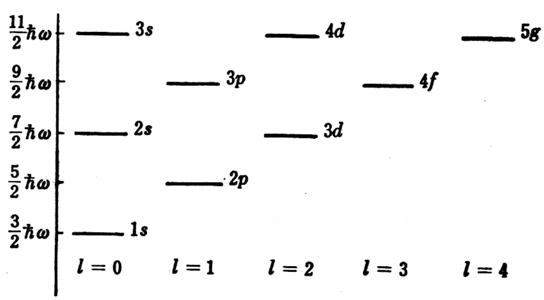
$$c_m = \sum_{l\geq|m|} d_l,$$

したがって

$$d_l = c_l - c_{l+1}.$$

表 (89) を参照すれば，$l = n, n-2, \cdots, n-2s, \cdots$ のとき，すなわち0と n のあいだ（両端を含む）にあって $(-)^n$ と同じ偶奇性をもつ l の整数値に対してはつねに $d_l = 1$ であり，それ以外の l の値に対してはつねに $d_l = 0$ であることがわかる．

結局，エネルギーの各固有値 $(n+3/2)\hbar\omega$ に対して，はっきり決まった角運動量 (lm) をもつ状態が $(n+1)(n+2)/2$ 個定まる．l のとりうる値の一つ一つに対して，$(2l+1)$ 個の固有状態が存在し，m が $-l$ から $+l$ まで動いてとる $(2l+1)$ 個の値にそれぞれ対



12・1図 3次元調和振動子のスペクトル

応する．l のとりうる値は，

$(-)^n=1$ のとき　　$n, n-2, \cdots, 0$　　（$(n+2)/2$ 個の異なる値）

$(-)^n=-1$ のとき　　$n, n-2, \cdots, 1$　　（$(n+1)/2$ 個の異なる値）．

12・1 図のスペクトル図表は，3次元等方性調和振動子の基底状態と最初のいくつかの励起状態を示す．この図表を水素原子の図表（第11章，11・1 図）と比較すれば，示唆を受けることが多い．

演 習 と 問 題

1. a と $a^\dagger$ は互いにエルミート共役な演算子で，$[a, a^\dagger]=1$ とする．$N=a^\dagger a$ と置くとき，つぎのことを示せ：

i) $[N, a^p]=-pa^p$，$[N, a^{\dagger p}]=+pa^{\dagger p}$　（p は正の整数）．

ii) a と $a^\dagger$ の代数的な関数〔多項式〕で N と交換するものは N の関数だけである．

2. 問題1の a と $a^\dagger$ は逆をもたないことを示せ．

3. 表現 $\{N\}$ において演算子 q と p を表わす行列をつくれ（§5の記号）．これらがエルミートで交換関係（2）を満たすことを確かめよ．この表現において q の固有値問題を述べよ．q のスペクトルは縮退がなく，連続で，$-\infty$ から $+\infty$ までひろがっていることを確かめよ．固有値0に対する固有ベクトルを具体的につくれ．

4. 状態 $|n\rangle$ にある量子振動子の性質を，同じエネルギーをもつ古典振動子のミクロカノニカル集合（§10）の性質とくらべたい．この量子状態における変数 q の統計的分布は，n が大きくなるほど細かい振動を示し，$n\to\infty$ の極限において，いくつかの振動についてその値を平均すると，古典振動子の集合についての対応する分布に近づく．このことを示せ（WKB 法を用いよ）．

5. 調和振動子の波束に関して，平均値

$$\chi=\langle q^2\rangle-\langle q\rangle^2, \qquad \varpi=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2, \qquad \eta=\langle pq+qp\rangle-2\langle p\rangle\langle q\rangle$$

の初期値をそれぞれ χ_0, ϖ_0, η_0 とする．これらの平均値が時刻の関数として変化する法則を求めよ．これらは $A+B\cos 2\omega t+C\sin 2\omega t$ という形の関数であり，χ と ϖ が定数となるのは，

$$\eta_0=0, \qquad \varpi_0=m^2\omega^2\chi_0$$

のときだけであることを示せ．

6. ある調和振動子の状態が時刻0において最小波束

$$f(q)=(2\pi\sigma)^{-1/4}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle q-\frac{(q-\langle q\rangle)^2}{4\sigma}\right]$$

によって表わされている．時間が経過してもこの波束が最小波束のままで保たれるのは，$\sigma=\hbar/2m\omega$ の場合だけであることを示せ（問題5を参照）．

以下この条件が満たされていると仮定する．このとき $f(q)$ はベクトル

$$|f\rangle=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle q\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\langle q\rangle p\right)|0\rangle$$

を表わす波動関数であることを示せ．このことから（等式 (29) を用い），関数 $f(q,t)$ は $f(q)$ のなかの時刻 0 における平均値 $\langle q\rangle$, $\langle p\rangle$ を時刻 t における値に置き換えて得られる式に位相因数を除けば等しいことを導け．ハミルトニアンの固有ベクトルの級数として $|f\rangle$ を展開するとき，この係数 c_n を決定せよ．また

$$|c_n|^2 = \mathrm{e}^{-\alpha}\frac{\alpha^n}{n!} \qquad \left(\alpha = \frac{E_{\mathrm{cl.}}}{\hbar\omega},\ E_{\mathrm{cl.}} = \frac{\langle p\rangle^2 + m^2\omega^2\langle q\rangle^2}{2m}\right)$$

であることを示せ．

7.　ブロッホの定理（§12）は古典調和振動子にも適用され，熱力学的平衡にある量子調和振動子に対する $\alpha q + \beta p$ の統計的分布は，$kT \gg \hbar\omega$ となる極限において古典分布に近づくことを確かめよ．

8.　Oz の方向を向いた一定で一様な磁場 $\mathcal{H}$ のなかにあって，質量 m，電荷 e をもつ 1 粒子のハミルトニアンは，

$$H_\rho = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{e}{2mc}\mathcal{H}\,l_z + \frac{e^2}{8mc^2}\mathcal{H}^2(x^2+y^2)$$

と置くとき，

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + H_\rho$$

という形に書き表わされることを示せ．

演算子 p_z, l_z, H_ρ は交換する運動の定数の完全集合をつくり，これらに共通の固有関数は円柱座標 (z, ρ, θ) に関して $\exp(\mathrm{i}kz)\exp(\mathrm{i}\lambda\theta)\, v_{\lambda n}(\rho)$ という形に書き表わされる［k は任意の実数；$\lambda = 0, \pm1, \pm2, \cdots, \pm\infty$；$n = 0, 1, 2, \cdots, \infty$］．このことを示せ．対応する固有値はそれぞれ

$$\hbar k,\ \ \hbar\lambda,\ \ (2n+1)\frac{e\hbar}{2mc}\mathcal{H}$$

である．これらの結果を第 2 章の問題 4 の結果と比較せよ．

まあ，驚いた！　あなたのお父さまったら，
なんて俗臭フンプンなんでしょう！
《才女気取り》第5景

第3部
対称性と不変量

前頁に引用されている《才女気取り》(*Les Précieuses Ridicules*) は，モリエール (1622〜1672) が1659年につくった1幕の喜劇．前頁に記したのは鈴木力衛氏の訳であるが，直訳すれば“あなたのお父さんの魂は肉体に圧倒されてしまっている”という程度の意味

第13章　量子力学における角運動量

§ 1.　序　　説

変化の方程式がもつ対称の性質は量子力学においても古典力学の場合と同様にきわめて大きな役割を演じる．対称性とその結果に関する系統的で一般的な研究は第15章でなされよう．本章は，対称性のうちでも最も重要な型の一つ，すなわち回転に関する対称性に当てられる．古典力学の場合と同じように，量子力学における系の回転にも角運動量が介入し，回転による変化の方程式の不変性は，角運動量が運動の定数であるという事実によって説明される．古典力学との相違は，角運動量がベクトル演算子であって普通のベクトルではないことと，その三つの成分が互いに交換しないということからくる．

第Ｉ節では，角運動量を成分J_x, J_y, J_zの交換関係（式（3））によって定義し，この関係と，これら三つの成分がオブザーバブルであるという事実だけに基づいて，J^2とJ_zの固有値問題を解く．ここで用いる方法はディラックによるもので，これと第12章で説明した調和振動子の取り扱いとのあいだには大きな類似が見られる．

第II節は一つの特殊な場合，すなわち１粒子の軌道角運動量の場合と，それに対応する固有関数である球面調和関数の構成に当てられる．

第III節では角運動量と回転とのあいだに関連をつける．一つの物理系の回転は，この系の全角運動量の成分によって定まる一つの演算子によって具体的に表わされ，その表わし方は公式（60）によって与えられる．つぎに，系の変化の方程式の回転による不変性は，そのハミルトニアンが角運動量の３成分と交換するという条件と同値であることを証明する．このことから角運動量保存の法則が出る．

実験の示すところによると，大部分の粒子は固有の角運動量すなわちスピンをもっている．スピンの概念については第IV節で検討する．

第Ｖ節は角運動量の合成という重要な問題に当てられる．

量子力学におけるいろいろな演算子は，回転に対する変換法則によって特徴づけられる．特に，スカラー演算子（すなわち回転による不変量），ベクトル演算子，さらにもっと一般に既約テンソン演算子が定義される．これらの変換法則はとりわけ簡明である．これらの演算子はまた，角運動量の成分とのあいだのごく簡単な交換規則によってもうまく特徴づけられる．これらの規則から，既約テンソル演算子の表現の性質がいくつか出てく

る（ウィグナー=エッカルトの定理）．これらの性質ならびにその主な応用は本章最後の第VI節で明らかにされる．

この章は付録Cによって補われる．そこでは，回転および角運動量の合成に関する取り扱いに関係したいろいろな係数について，主な公式と主な性質がまとめられている．

I．角運動量の固有値と固有ベクトル

§2.　角運動量の定義

われわれはすでに1粒子の量子系を取り扱うとき角運動量演算子に出会った．定義によれば，この粒子の角運動量 $\boldsymbol{l}$ は

$$\boldsymbol{l} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} \tag{1}$$

であり，$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ はそれぞれこの粒子の位置および運動量ベクトルである．波動力学では，$\boldsymbol{l}$ はベクトル演算子[1]（$-\mathrm{i}$）$\boldsymbol{r}\times\nabla$ によって表わされる．このベクトルの三つの成分は交換関係

$$[l_x, l_y] = \mathrm{i}\, l_z, \qquad [l_y, l_z] = \mathrm{i}\, l_x, \qquad [l_z, l_x] = \mathrm{i}\, l_y \tag{2}$$

を満たす微分演算子である．これらはいずれも角運動量の大きさの二乗

$$\boldsymbol{l}^2 \equiv l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$$

と交換する．すなわち

$$[\boldsymbol{l}, \boldsymbol{l}^2] = 0.$$

これらの性質はすでに証明してある（第5章，§18）．最後にあげたものは関係（2）の簡単な結果であることを思い出そう．

$\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{l}$ はベクトル演算子である．先をつづける前に，これが何を意味するかを明らかにしておこう．一つのベクトル演算子 $\boldsymbol{B}$ は三つの直交軸の方向の成分 B_x, B_y, B_z によって定められる．B_x, B_y, B_z は普通の意味での演算子である．これら三つの特殊な成分を与えることにより，空間内の単位ベクトル $\boldsymbol{u}(u_x, u_y, u_z)$ によって定められた任意の方向に対して，$\boldsymbol{B}$ の成分 B_u を定めることができる．すなわち

$$B_u \equiv (\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{B}) = u_x B_x + u_y B_y + u_z B_z.$$

このようにして他のどんな直交座標系に対しても $\boldsymbol{B}$ の成分が定められる．ベクトル代数のいろいろな計算（和，内積，外積など）は，演算子の順序に関するいくつかの考慮を払えば，そのままベクトル演算子に適用される（第9章，§2参照）．

さて，N粒子から成る量子系を考えよう．上に述べたように，n 番目の粒子の角運動量

---

(1)　本章では $\hbar = 1$ となるように単位を選ぶ．

$\boldsymbol{l}^{(n)}=\boldsymbol{r}^{(n)}\times\boldsymbol{p}^{(n)}$ を定めることができる．系の全角運動量は，系を構成する N 個の粒子の角運動量のベクトル和

$$\boldsymbol{L}=\sum_{n=1}^{N}\boldsymbol{l}^{(n)}$$

である．部分角運動量 $\boldsymbol{l}^{(n)}$ は交換関係（2）を満たし，一つの粒子の角運動量の成分は他のどんな粒子の角運動量の成分とも交換するから，

$$[L_x, L_y]=\sum_n\sum_{n'}[l_x^{(n)}, l_y^{(n')}]=\sum_n[l_x^{(n)}, l_y^{(n)}]=\mathrm{i}\sum_n l_z^{(n)}=\mathrm{i}L_z$$

が成り立つ．これから円置換によって導き出される二つの関係も同様にして得られる．その結果，全角運動量の成分も個々の角運動量の成分と同じ交換関係にしたがう．

それゆえわれわれは角運動量に対してつぎのような定義を採用すればよいことがわかる．ベクトル演算子 $\boldsymbol{J}$ の成分 J_x, J_y, J_z がオブザーバブルで，交換関係

$$[J_x, J_y]=\mathrm{i}J_z,\qquad [J_y, J_z]=\mathrm{i}J_x,\qquad [J_z, J_x]=\mathrm{i}J_y \tag{3}$$

を満たすとき，$\boldsymbol{J}$ は角運動量である．

これら三つの関係から，他の任意の座標系に対する $\boldsymbol{J}$ の成分のあいだの同じ関係が導き出される．直交する三つの座標軸が単位ベクトル $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}$ によって定められ，その向きが $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{v}$ となっているときに，この系に関する $\boldsymbol{J}$ の成分を J_u，J_v，J_w とする．関係式 $[J_u, J_v]=\mathrm{i}J_w$ と，これから円置換によって導かれる二つの関係式(2)を確かめることはやさしい．もっと一般に，任意の二つのベクトル（あるいは互いに交換し，$\boldsymbol{J}$ とも交換する二つのベクトル演算子）を $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ とするとき，

$$[(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{J}), (\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{J})]=\mathrm{i}((\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{J}) \tag{4}$$

が成り立つ．

§ 3.　特有の代数的関係

角運動量の大きさの二乗

$$\boldsymbol{J}^2\equiv J_x^2+J_y^2+J_z^2$$

は，三つの成分と交換する．この性質は交換関係（3）の結果であって，§2 で導入された

---

(2)　この関係式はつぎの簡潔な形にも書き表わされる（$i, j, k=u, v$ または w）：

$$[J_i, J_j]=\mathrm{i}\sum_k\varepsilon_{ijk}J_k\quad \text{あるいはまた}\quad \sum_{i,j}\varepsilon_{ijk}J_iJ_j=\mathrm{i}J_k.$$

ここで ε_{ijk} は三つの添字について完全に反対称なテンソル，すなわち

$$\varepsilon_{ijk}=\begin{cases}0 & (\text{二つの添字が等しいとき})\\ +1 & (ijk\ \text{が}\ uvw\ \text{から偶置換で得られるとき})\\ -1 & (ijk\ \text{が}\ uvw\ \text{から奇置換で得られるとき})\end{cases}$$

である．二番目の式はベクトル演算子のあいだの等式

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\boldsymbol{J}$$

と同値である．

角運動量 l に関する類似の性質と同じ方法で証明される．われわれは $\boldsymbol{J}^2$ のもつこの性質を記号的に

$$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}^2] = 0 \tag{5}$$

と書こう．その結果 $\boldsymbol{J}^2$ は $\boldsymbol{J}$ の成分の関数とつねに交換する．

エルミート共役な二つの演算子

$$J_+ = J_x + \mathrm{i}J_y, \qquad J_- = J_x - \mathrm{i}J_y \tag{6}$$

を導入する．三つの演算子 J_+, J_-, J_z を与えると，ベクトル演算子 $\boldsymbol{J}$ は完全に定まり，どんな代数的計算をするにも，これら三つの演算子を使う方が成分 J_x, J_y, J_z を用いるよりむしろつごうのよいことが示される．これらの交換関係は関係式（3）から導き出され，

$$[J_z, J_+] = J_+ \tag{7a}$$

$$[J_z, J_-] = -J_- \tag{7b}$$

$$[J_+, J_-] = 2J_z \tag{7c}$$

である．他方，（5）によれば，

$$[\boldsymbol{J}^2, J_+] = [\boldsymbol{J}^2, J_-] = [\boldsymbol{J}^2, J_z] = 0 \tag{8}$$

であり，$\boldsymbol{J}^2$ はまた

$$\boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2$$

という式で表わされる．これから，(7c) を使って二つの等式

$$J_-J_+ = \boldsymbol{J}^2 - J_z(J_z+1) \tag{9a}$$

$$J_+J_- = \boldsymbol{J}^2 - J_z(J_z-1) \tag{9b}$$

が導き出される．

§ 4.　$\boldsymbol{J}^2$ と J_z のスペクトル

$\boldsymbol{J}^2$ は $\boldsymbol{J}$ の各成分と交換するから，$\boldsymbol{J}^2$ およびこれらの成分の一つ，たとえば J_z に共通な固有ベクトルの完全系をつくることができる．J_x, J_y, J_z がエルミートであり，交換関係（3）にしたがうという事実によって，固有ベクトルのスペクトルに厳しい条件がつけられる．

$\boldsymbol{J}^2$ は定符号エルミート演算子の和であるから，$\boldsymbol{J}^2$ 自体も定符号エルミート演算子である[3]．その固有値は必ず正（または0）である．今後はこれらを $j(j+1)$ の形に書き，

---

[3]　これは J_x, J_y, J_z のエルミート性から出る結果である．どんな $|u\rangle$ に対しても，$\langle u|J_x^2|u\rangle$ はベクトル $J_x|u\rangle$ のノルムであり，したがって $\geqslant 0$ の量である．J_y^2，J_z^2 の平均値も同じ性質をもつから，任意の $|u\rangle$ に対して確かに $\langle u|\boldsymbol{J}^2|u\rangle \geqslant 0$ が成り立つ．

実の量子数 $j\ (\geqslant 0)$ によって表示しよう．

$\boldsymbol{J}^2$ の固有値 $j(j+1)$ と J_z の固有値 m に対応する共通の固有ベクトルを $|jm\rangle$ とする．通常われわれは，$|jm\rangle$ が角運動量 (jm) の状態を表わすと言うであろう．$\boldsymbol{J}^2$ と J_z が交換するオブザーバブルの完全集合をつくらないときには，線形独立な状態 (jm) がいくつか存在しうる．この場合，$|jm\rangle$ は角運動量 (jm) の部分空間のなかから一つだけ選んだ特殊なケットベクトルである．このように選んだどのベクトルに対しても，以下の議論は成り立つ．$|jm\rangle$ に課せられた条件は

$$\boldsymbol{J}^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle$$
$$J_z|jm\rangle = m|jm\rangle$$

だけである．

ベクトル $J_+|jm\rangle$ と $J_-|jm\rangle$ を調べよう．

等式 (9 a) と (9 b) によれば，

$$J_-J_+|jm\rangle = [j(j+1)-m(m+1)]|jm\rangle \equiv (j-m)(j+m+1)|jm\rangle \qquad (10\,\mathrm{a})$$
$$J_+J_-|jm\rangle = [j(j+1)-m(m-1)]|jm\rangle \equiv (j+m)(j-m+1)|jm\rangle \qquad (10\,\mathrm{b})$$

が成り立つ．したがってベクトル $J_+|jm\rangle$ と $J_-|jm\rangle$ はノルムとしてそれぞれ

$$\langle jm|J_-J_+|jm\rangle = (j-m)(j+m+1)\langle jm|jm\rangle$$
$$\langle jm|J_+J_-|jm\rangle = (j+m)(j-m+1)\langle jm|jm\rangle$$

をもつ．ヒルベルト空間の基本公理の一つによって，これらのノルムは負になりえない．それゆえ

$$(j-m)(j+m+1) \geqslant 0, \qquad (j+m)(j-m+1) \geqslant 0,$$

すなわち

$$-j \leqslant m \leqslant j.$$

さらに，ノルムが 0 であることはベクトルが 0 になるための必要十分な条件であるから，$J_+|jm\rangle = 0$ となるのは $(j-m)(j+m+1) = 0$ のときだけであり，$J_-|jm\rangle = 0$ となるのは $(j+m)(j-m+1) = 0$ のときだけである．m は必ず区間 $(-j, +j)$ にあるから，上記の 0 になる条件はそれぞれ $m = j$ および $m = -j$ に帰着する．

$m \neq j$ のとき，（0 でない）ベクトル $J_+|jm\rangle$ は角運動量 $(j, m+1)$ のベクトルである．実際，規則（8）によれば，

$$\boldsymbol{J}^2 J_+|jm\rangle = J_+\boldsymbol{J}^2|jm\rangle = j(j+1)J_+|jm\rangle$$

であり，交換関係 (7 a) によって

$$J_zJ_+ = J_+(J_z+1) \qquad (11\,\mathrm{a})$$

となるから，

$$J_zJ_+|jm\rangle = J_+(J_z+1)|jm\rangle = (m+1)J_+|jm\rangle$$

が得られる．J_- が $\boldsymbol{J}^2$ と交換することと，関係 (7 b) から導かれる式

$$J_z J_- = J_-(J_z - 1) \tag{11 b}$$

を使えば，$J_-|j\,m\rangle$ に対しても類似の結果が得られる．

以上の議論をまとめると，つぎの重要な定理になる．

$|j\,m\rangle$ が角運動量 $(j\,m)$ とノルム N をもつベクトルであるとき，

i）必ず $-j \leqslant m \leqslant j$.　　(12)

ii）$m = j$ ならば，$J_+|j\,m\rangle = 0$,

$m \neq j$ ならば，$J_+|j\,m\rangle$ は必ず角運動量 $(j\ m+1)$ とノルム $[j(j+1)-m(m+1)]N$ をもつベクトルである．

iii）$m = -j$ ならば，$J_-|j\,m\rangle = 0$

$m \neq -j$ ならば，$J_-|j\,m\rangle$ は必ず角運動量 $(j\ m-1)$ とノルム $[j(j+1)-m(m-1)]N$ をもつベクトルである．

そこで，$|j\,m\rangle$ に演算子 J_+ を繰り返し適用して得られるベクトルの列

$$J_+|j\,m\rangle,\ J_+^2|j\,m\rangle,\ \cdots,\ J_+^p|j\,m\rangle,\ \cdots \tag{13}$$

を考えよう．$-j \leqslant m \leqslant j$ であることは知られている．$m = j$ ならば，$J_+|j\,m\rangle = 0$. $m < j$ ならば，$J_+|j\,m\rangle$ は0でなく，角運動量 $(j\,m+1)$ をもつベクトルである．それゆえ $\boldsymbol{J}^2$ と J_z に共通な固有ベクトルの全部を特徴づける性質 i)，ii)，iii) をもつ．すなわち必ず $m+1 \leqslant j$. $m+1 = j$ ならば，$J_+^2|j\,m\rangle = 0$. $m+1 < j$ ならば，$J_+^2|j\,m\rangle$ は0でなく，角運動量 $(j\,m+2)$ をもつベクトルであり，したがってこれもまた $\boldsymbol{J}^2$ と J_z に共通な固有ベクトルの全部を特徴づける性質 i)，ii)，iii) をもつ．このように，列 (13) に属するベクトルの性質を一つずつ分析してゆくことができる．明らかに，この列のベクトルはある段階から先へゆくとすべて0にならなければならない．そうでないとすれば，あらかじめ与えられた任意の数よりも大きな固有値に対する J_z の固有ベクトルをつくれるはずであるが，それは条件 (12) と矛盾する．(12) によれば J_z の固有値が j を越えることはありえない．それゆえ，一つの整数 $p\,(\geqslant 0)$ がつぎのように定まる：$J_+^p|j\,m\rangle$ は0でなく，角運動量 $(j\ m+p)$ をもち，このベクトルに J_+ を作用させると0になる．このことから $m+p = j$ を得る．結局，$j-m = p$ は整数 $(\geqslant 0)$ で，p 個のベクトル

$$J_+|j\,m\rangle,\ J_+^2|j\,m\rangle,\ \cdots\cdots,\ J_+^p|j\,m\rangle \tag{14}$$

は，全体を通じて同じ $\boldsymbol{J}^2$ の固有値 $j(j+1)$ に対応し，それぞれ J_z の固有値

$$m+1,\ m+2,\ \cdots,\ m+p = j$$

に対応して定まる角運動量の状態を表わす．

$|jm\rangle$ に J_- を繰り返し適用して得られるベクトルを吟味すれば，同じような結論を引き出すことができる．すなわち $j+m\equiv q$ もまた整数 $\geqslant 0$ であり，q 個のベクトル

$$J_-|jm\rangle,\ J_-^2|jm\rangle,\ \cdots,\ J_-^q|jm\rangle$$

は，全体を通じて同じ J^2 の固有値 $j(j+1)$ に対応し，それぞれ J_z の固有値

$$m-1,\ m-2,\ \cdots,\ m-q=-j$$

に対応して定められる角運動量の状態を表わす．さらに，p と q は両方とも負でない整数であるから，$p+q=2j$ も同じ性質をもつ．

これらの結果をまとめると，つぎの基本定理が得られる．

A）J^2 のとりうる固有値は $j(j+1)$ の形をしているものだけであり，j は負でない整数または半整数である：$j=0, 1/2, 1, 3/2, 2, \cdots, \infty$.

B）J_z のとりうる固有値は整数と半整数だけである：

$$m=0,\ \pm1/2,\ \pm1,\ \pm3/2,\ \pm2,\ \cdots,\ \pm\infty.$$

C）J^2 と J_z に共通な一つの固有状態に対して，これら二つの演算子のとる固有値をそれぞれ $j(j+1)$, m とすれば，――すなわちこの状態が角運動量 (jm) をもつときは――m のとりうる値は $(2j+1)$ 個の量

$$-j,\ -j+1,\ \cdots,\ +j$$

のうちの一つだけである．

§5. J^2 と J_z の固有ベクトル．不変部分空間 $\mathscr{E}^{(j)}$ の構成

角運動量の決められた一つのベクトル $|jm\rangle$ から出発して，J_+ と J_- を繰り返し適用することにより，角運動量の決められたベクトルを全部で $(2j+1)$ 個つくることができる．これらのベクトルは一般に 1 に規格化されていない．しかしこの方法でノルム 1 の固有ベクトルをつくることはきわめてやさしい．それをつぎのような方法で進めることができる．

$|jm\rangle$ のノルムは 1 に等しいとしよう．$m=j$ ならば $J_+|jm\rangle$ は 0 である．$m<j$ ならば，これは角運動量 $(j\,m+1)$ のベクトルである．

$$J_+|jm\rangle=c_m|j\,m+1\rangle$$

で定められるノルム 1 のベクトルを $|j\,m+1\rangle$ で表わす．$J_+|jm\rangle$ のノルムを表わす式をさきに与えたが，これによると

$$|c_m|^2=[j(j+1)-m(m+1)]. \tag{15}$$

$|j\,m+1\rangle$ の位相を固定するため，c_m は正の実数とする．この規約によって上記のベクトルは完全に定まり，

$$J_+|jm\rangle=\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,|j\,m+1\rangle.$$

この関係式の両辺に J_- を掛け，関係式 (10 a) を考えに入れると，同じようにして

$$J_-|j\,m+1\rangle=\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,|j\,m\rangle$$

が得られる．

このような操作はベクトル $|j\,m+1\rangle$ についても繰り返される．いたるところで m を $m+1$ に置き換えさえすればよい．$m+1=j$ ならば，$J_+|j\,m+1\rangle=0$．そうでなければ，角運動量 $(j\,m+2)$ をもつノルム1のベクトル $|j\,m+2\rangle$ をつくる．上に述べたのと同じような規約により位相は固定される．以下同様にして $|j\,j\rangle$ まで定まる．

同じように，J_- を繰り返し適用することにより，それぞれ角運動量 $(j\,m-1)$, …, $(j\,-j)$ をもつノルム1のベクトル $|j\,m-1\rangle,\cdots,|j\,-j\rangle$ が順々につくられる．これらの位相は前と同じ規約によって固定される．

このように，われわれはベクトル $|j\,m\rangle$ から出発して $(2j+1)$ 個の直交規格化ベクトルの列

$$|j\,j\rangle,\ |j\,j-1\rangle,\ \cdots,\ |j\,m\rangle,\ \cdots,\ |j\ -j\rangle \tag{16}$$

をつくる．これらは固有値方程式

$$J^2|j\,\mu\rangle=j(j+1)|j\,\mu\rangle \tag{17}$$

$$J_z|j\,\mu\rangle=\mu|j\,\mu\rangle \tag{18}$$

を満たし，これらの相対的な位相は，関係式

$$J_+|j\,\mu\rangle=\sqrt{j(j+1)-\mu(\mu+1)}\,|j\,\mu+1\rangle \tag{19}$$

$$J_-|j\,\mu\rangle=\sqrt{j(j+1)-\mu(\mu-1)}\,|j\,\mu-1\rangle \tag{20}$$

によって一方から他方が導き出されるように選ばれている．特に

$$J_+|j\,j\rangle=J_-|j\ -j\rangle=0. \tag{21}$$

これら $(2j+1)$ 個のベクトルは一つの部分空間 $\mathcal{E}^{(j)}$ を張る．演算子 J_+, J_-, J_z はこれらのベクトルを一つからもう一つへ変換するから，$\mathcal{E}^{(j)}$ の任意のベクトルを $\mathcal{E}^{(j)}$ のベクトルに移す．言いかえると，これらの演算子は $\mathcal{E}^{(j)}$ を不変にする．$\boldsymbol{J}$ の成分の関数 $F(\boldsymbol{J})$ はすべて演算子 J_+, J_-, J_z だけの関数であるから，やはり $\mathcal{E}^{(j)}$ を不変にする．第III節でわかることであるが，量子系全体の回転はすべてその状態ベクトルに $F(\boldsymbol{J})$ の型の演算子を適用することによって表わされる．したがって全体の回転はいずれも $\mathcal{E}^{(j)}$ を不変にする．

§6.　標準表現 $\{J^2 J_z\}$

J^2 と J_z が共立する変数の完全集合をつくらないときには，これら二つの演算子に共通な基底系は非常に多く存在する．また反対の場合でも，基底をつくる各ベクトルの位相は任意に選ばれる．

そうではあるが，J^2 と J_z を対角型にする表現のうちでも，いくつかのものは角運動量に関するすべての取り扱いを特に簡単にするという理由から，望ましい表現となっている．便宜上それらを標準表現 $\{J^2 J_z\}$ と呼ぶことにしよう．これらの表現においては，量子数 j の一つの値に対応する基底ベクトルがいくつかの列に分類され，各列は法則 (19)，(20) によって互いに移される $(2j+1)$ 個のベクトルから成る．各列に一つの部分空間 $\mathcal{E}^{(j)}$ が対応し，ヒルベルト空間全体はこの型の部分空間の結合によって構成される．

標準表現をつくるには，つぎのようにすればよい．J^2 の固有値 $j(j+1)$ に対する固有ベクトルのうち，$J_z=j$ とするようなものを考える．これらはヒルベルト空間のなかである部分空間 $\mathcal{F}^{(j)}$ をつくる．$\mathcal{F}^{(j)}$ は場合により1次元であるかもしれないし，多次元あるいは無限次元であるかもしれない．$\mathcal{F}^{(j)}$ のなかから直交規格化ベクトルの完全系 $|\tau jj\rangle$ を選ぶことはいつでもできる．角運動量 (jj) をもつこれらのベクトルは，添字 τ によって互いに区別される．場合により τ は一つの値，あるいはいくつかの値，あるいは無限個の値（とびとびの場合も連続の場合もありうるが，ここではとびとびであると仮定する）をとりうる．仮定により

$$\langle\tau jj|\tau' jj\rangle=\delta_{\tau\tau'}$$

が成り立つ．

これらのベクトル $|\tau jj\rangle$ の一つ一つに，§5 の方法にしたがい，J_- を繰り返し適用することによって得られる $2j$ 個のベクトルを結びつけ，その結果 $(2j+1)$ 次元の部分空間 $\mathcal{E}^{(j)}$ をつくることができる．こうして構成された部分空間の一つ一つを互いに区別するために，これを $\mathcal{E}(\tau j)$ で表わそう．このようにすれば，部分空間 $\mathcal{E}(\tau j)$ の $(2j+1)$ 個の基底ベクトルは

$$|\tau jj\rangle,\ |\tau jj-1\rangle,\ \cdots,\ |\tau j\,-j\rangle$$

となる．これらのベクトルは直交規格化系をつくり，基本関係

$$J^2|\tau j\mu\rangle=j(j+1)|\tau j\mu\rangle \tag{22}$$

$$J_z|\tau j\mu\rangle=\mu|\tau j\mu\rangle \tag{23}$$

$$J_+|\tau j\mu\rangle=\sqrt{j(j+1)-\mu(\mu+1)}\,|\tau j\mu+1\rangle \tag{24}$$

$$J_-|\tau j\mu\rangle=\sqrt{j(j+1)-\mu(\mu-1)}\,|\tau j\mu-1\rangle \tag{25}$$

を満たす．

ついでながら重要な関係式

$$|\tau j\pm\mu\rangle=\sqrt{\frac{(j+\mu)!}{(2j)!\,(j-\mu)!}}\,J_{\mp}^{j-\mu}|\tau j\,\pm j\rangle \tag{26}$$

$$|\tau j\pm j\rangle=\sqrt{\frac{(j+\mu)!}{(2j)!\,(j-\mu)!}}\,J_{\pm}^{j-\mu}|\tau j\,\pm\mu\rangle \tag{27}$$

に注意しておく．これらは (24) と (25) から容易に導かれる (問題1)．

部分空間 $\mathcal{E}(\tau j)$ (j は与えられた値，τ は変数) のあいだでは，どの二つをとっても互いに直交し，それらを全部結合すれば，$\boldsymbol{J}^2$ の固有値 $j(j+1)$ に対する部分空間 $\mathcal{E}_j$ をつくることも容易に確かめられる．

実際，部分空間 $\mathcal{E}(\tau j)$ と $\mathcal{E}(\tau' j)$ $(\tau \neq \tau')$ の基底ベクトル $|\tau j \mu\rangle$ と $|\tau' j \mu'\rangle$ は，$\mu \neq \mu'$ のとき確かに直交する．それらは J_z の異なる固有値に対応するからである．ところで $\mu = \mu'$ のときにも，(24) を繰り返し適用すれば，

$$\langle \tau' j \mu | \tau j \mu\rangle = \langle \tau' j \mu+1 | \tau j \mu+1\rangle = \cdots = \langle \tau' j j | \tau j j\rangle = \delta_{\tau\tau'}$$

となって，やはり直交する．他方，$\boldsymbol{J}^2$ の固有値 $j(j+1)$ に対する固有ベクトルはすべてベクトル $|\tau j \mu\rangle$ (τ と μ は変数，j は固定) の線形結合である．これを確かめるには，角運動量 $(j\mu)$ をもつ任意のベクトル $|\varpi j \mu\rangle$ が，同じ角運動量をもつ基底ベクトル $|\tau j \mu\rangle$ の線形結合であることを示せばよい．$\mu = j$ ならば，これは最初の仮定によって成り立つ．$\mu \neq j$ のときは，ベクトル $|\varpi j \mu\rangle$ に演算子 $J_+^{j-\mu}$ を適用し，関係式 (26) と (27) を使えば $\mu = j$ の場合に帰着する．

要約すれば，角運動量 (jj) をもつベクトルの完全直交規格化系から出発して，われわれは $\boldsymbol{J}^2$ の固有値 $j(j+1)$ に対する部分空間 $\mathcal{E}_j$ のなかに標準表現 $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ の基底ベクトルを構成することができたのである．$\boldsymbol{J}^2$ のとりうるすべての固有値に対して同じ操作を繰り返すことによって，全ヒルベルト空間に対する標準基底が得られる．

このような表現において $\boldsymbol{J}$ の成分を表わす行列が特に簡単な形をとることに注意しよう (問題2)．(23), (24), (25) によれば，

$$\begin{aligned}\langle \tau j \mu | J_z | \tau' j' \mu'\rangle &= \mu\, \delta_{\tau\tau'}\, \delta_{jj'}\, \delta_{\mu\mu'} \\ \langle \tau j \mu | J_\pm | \tau' j' \mu'\rangle &= \sqrt{j(j+1) - \mu\mu'}\, \delta_{\tau\tau'}\, \delta_{jj'}\, \delta_{\mu\,\mu'\pm1}\end{aligned} \tag{28}$$

が成り立つ．

§ 7.　結　　び

角運動量の性質に関する上記の研究は，もっぱらこのベクトル演算子の交換関係と，その成分がヒルベルト空間におけるエルミート演算子であるという事実だけに基づいている．これだけの仮定から導き出される結論は，量子数 j が〔負でない〕整数または半整数の値しかとりえないこと，$\boldsymbol{J}^2$ の各固有値 $j(j+1)$ には線形独立な $(2j+1)$ 個のベクトルからなる一つあるいはいくつかの列が対応すること，一つの列に属するベクトルは，演算子 J_- と J_+ との作用によって隣どうし結びつけられて，それぞれ量子数 m のとりうる $(2j+1)$ 個の値

$$-j,\ -j+1,\ \cdots,\ +j$$

に対応することなどである.

しかしながら，これらの仮定だけでは固有値問題を完全に解くことはできない．つぎの問題を明らかにすることが残っている.

i）整数あるいは半整数のうちで実際に j のスペクトルを構成するものはどれか.

ii）そのような j の値の一つ一つに，$(2j+1)$ 個のベクトルから成る線形独立な列がいく組対応するか.

これらの問に対する答は，取り扱う問題の特殊性によって異なる．交換関係だけに基づくならば，つぎのような場合を除外する根拠はすこしもない．すなわち，j がただ一つの整数または半整数の値しかとりえない場合，またこのただ一つの固有値に対して，線形独立な $(2j+1)$ 個のベクトルから成る列が一組しかなく，その結果状態空間が $(2j+1)$ 次元しかもたない場合である．このような場合の例はスピンに関連して第IV節に見いだされよう.

特殊な場合としてもう一つ重要なのは，（1）で定義されるような1粒子の角運動量 $\boldsymbol{l}$ の場合である．この場合は第II節で詳しく吟味されるが，そこでは j のスペクトルが0から $+\infty$ に至る整数の全体から成り，半整数はすべて除外されることを知るであろう[4].

II. 軌道角運動量と球面調和関数

§8. $\boldsymbol{l}^2$ と l_z のスペクトル

§2で思い出した1粒子の量子系にもどろう．極方向の軸として z 軸をとれば，$\boldsymbol{l}$ の成分と演算子 $\boldsymbol{l}^2$ は極座標の角 (θ, φ) およびそれらの変化率の関数として表わされる（付録B (82)—(84)）．これからさき，動径変数は考えないでよろしい．二つの固有値方程式

$$\boldsymbol{l}^2 F_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1) F_l^m(\theta, \varphi) \tag{29}$$

$$l_z F_l^m(\theta, \varphi) = m F_l^m(\theta, \varphi) \tag{30}$$

を満たす関数 $F_l^m(\theta, \varphi)$ をつくってみよう.

どのような波動関数も $\boldsymbol{r}$ についての1価関数であるから，φ を $\varphi+2\pi$ に置き換えるときに $F_l^m(\theta, \varphi)$ の値が変わってはならない[5]．方程式 (30) についてはすでに調べてある

(4) 問題15ではもう一つの場合を取り扱う．そこでは $\boldsymbol{J}^2$ と J_z が交換するオブザーバブルの完全集合をつくり（j の一つの値に $(2j+1)$ 個のベクトルの列がただ一組対応し），j はすべての〔負でない〕整数および半整数の値をとりうる．スペクトルのなかに整数値と半整数値が共存するという事実によって，$\boldsymbol{J}$ を角運動量と同一視する以上，この系のいろいろなオブザーバブルの物理的意味に関してある種の制限をつける必要が起こる（§15を参照）.

(5) 他方，$F_l^m(0, \varphi)$ と $F_l^m(\pi, \varphi)$ は φ に無関係である．以下に得られる固有解においては，これらの条件が自動的に満たされている.

(第5章，§12)．$l_z=-i\partial/\partial\varphi$ であるから，$F_l^m(\theta,\varphi)$ は必ず $f_l^m(\theta)e^{im\varphi}$ という形で，m は整数である．m が整数である以上，量子数 l もまた整数値しかとることができない．すなわち，半整数値の軌道角運動量は存在しない．

整数 ($\geqslant 0$) のうちから l の固有値とその縮退を決定するために，角運動量 ($l\,l$) に対応する固有関数 $F_l^l(\theta,\varphi)$ をつくってみる．このような関数は方程式

$$l_z F_l^l(\theta,\varphi)=lF_l^l(\theta,\varphi) \tag{31}$$

$$l_+F_l^l(\theta,\varphi)=0 \tag{32}$$

によって定められる．この方程式系は $m=l$ の場合の系 (29)，(30) と確かに同値である．実際，等式 (9 a) により，

$$\boldsymbol{l}^2=l_z(l_z+1)+l_-l_+.$$

したがって方程式 (32) と (31) から方程式 (29) が導かれ，逆も成り立つ．系 (31)，(32) は1階の偏微分方程式系であり，微分演算子 l_z と l_+ がはっきりしさえすれば容易に解かれる（付録 B (82), (83)）．方程式 (31) から

$$F_l^l(\theta,\varphi)=f_l(\theta)e^{il\varphi}.$$

この式を方程式 (32) に代入すると，微分方程式

$$\left(\frac{d}{d\theta}-l\cot\theta\right)f_l(\theta)=0$$

が得られ，この解は定数を除いて $\sin^l\theta$ である．結局，l の任意の整数値 ($\geqslant 0$) に対して，角運動量 ($l\,l$) をもつ固有関数が（定数を除いて）ただ一つだけ定まり，それは関数

$$\sin^l\theta\, e^{il\varphi}$$

である．

その結果，$\boldsymbol{l}^2$ のスペクトルは $l(l+1)$ の形の数列から成り，l は0から $+\infty$ までのすべての整数値をとる．各固有値 $l(l+1)$ には，l_z の固有値 m が $(2l+1)$ 個対応する．すなわち区間 $(-l,+l)$ に含まれる $(2l+1)$ 個の整数である．こうしてつくられた ($l\,m$) の各組には，（角 θ と φ の関数に限れば）ただ一つの固有状態が対応する．すなわち $\boldsymbol{l}^2$ と l_z のスペクトルにはまったく縮退がない．

§9.　球面調和関数の定義と構成

$\boldsymbol{l}^2$ と l_z に共通な固有関数で，量子数の組 ($l\,m$) に対応するものは，定数を除いて定まる．これが1に規格化されることを要求し，位相について適当な規約を採用すれば，この関数は一意的に決定される．こうして位数 ($l\,m$) の球面調和関数が得られる．それを記号 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ で表わす．

θ と φ の関数のあいだで内積をとるとき，積分の面積要素として $d\Omega=\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ をとれば，関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ の全体は直交規格化系をつくる．この系が完全であることは証明

を省いて認めることにする．

位相に関してはつぎのような規約を採用する[6]．第一に，Y_l^m は標準基底をつくることが要求される．そのためには，これらが表現 $\{\theta\,\varphi\}$ において書かれた等式 (24), (25) を満たせばよい（付録 B (89)）．l の一つの値に対する $(2l+1)$ 個の球面調和関数の相対的な位相はこうして定まるから，残るところはこれらのうちの一つ，たとえば $Y_l^0(\theta,\varphi)$ の位相を決めることである．そのためには，$Y^0(0,0)$ が正の実数であるという条件をつける．

表現 $\{\theta\,\varphi\}$ において球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ が表わすケットベクトルを $|l\,m\rangle$ と書き表わせば，このように定められたベクトルは (24), (25) を満たす．それゆえ（式 (26)）

$$|l\,m\rangle=\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\,l_-^{l-m}|l\,l\rangle=\sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!\,(l+m)!}}\,l_+^{l+m}|l-l\rangle.$$

言いかえれば，

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\,l_-^{l-m}\,Y_l^l(\theta,\varphi) \tag{33}$$

$$=\sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!\,(l+m)!}}\,l_+^{l+m}\,Y_l^{-l}(\theta,\varphi). \tag{34}$$

微分演算子 l_- と l_+ の具体的な形は付録 B の (83) に与えられている．それらを表わす式から，

$$l_\pm e^{i\mu\varphi}f(\theta)=\mp e^{i(\mu\pm1)\varphi}\left(\sin^{1\pm\mu}\theta\frac{d}{d(\cos\theta)}\sin^{\mp\mu}\theta\right)f(\theta)$$

が導かれる．$f(\theta)$ が何であっても，右辺の括弧のなかにある式は，その右にある関数 $f(\theta)$ に作用する演算子であると考えなければならない．したがって，関数 $e^{i\mu\varphi}f(\theta)$ に l_+ または l_- を繰り返し作用させると，

$$l_\pm^s e^{i\mu\varphi}f(\theta)=(\mp)^s e^{i(\mu\pm s)\varphi}\left(\sin^{s\pm\mu}\theta\frac{d^s}{d(\cos\theta)^s}\sin^{\mp\mu}\theta\right)f(\theta) \tag{35}$$

が得られる（μ と s は整数）．

§8 の議論によれば，

$$Y_l^l(\theta,\varphi)=c_l\sin^l\theta\,e^{il\varphi}$$

であることがわかる．ここで定数 c_l の絶対値は Y_l^l の規格化条件によって定まり，

$$|c_l|=(4\pi)^{-1/2}\frac{\sqrt{(2l+1)!}}{2^l\,l!} \tag{36}$$

---

(6) この規約は大部分の書物において採用されているものである．これは特に便利なものであることが示される．しかし，時間の反転における不変性が問題になる議論では，配置空間において波動関数を取り扱うとき，関数 $\mathcal{Y}_l^m(\theta,\varphi)\equiv i^l Y_l^m(\theta,\varphi)$ を使う方が優れている．

となる．その位相をさきに採用した規約にしたがって定めることが残されている．

Y_l^l を表わす上記の式を (33) に代入し，等式 (35) を考えに入れると，

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = c_l\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\sin^{-m}\theta\frac{\mathrm{d}^{l-m}}{\mathrm{d}(\cos\theta)^{l-m}}\sin^{2l}\theta \qquad (37)$$

が得られる．$m=-l$ のときこの式を計算すれば，結果は

$$Y_l^{-l}(\theta,\varphi) = (-)^l c_l \mathrm{e}^{-\mathrm{i}l\varphi}\sin^l\theta \qquad (38)$$

となる．この式を (34) に代入し，もう一度等式 (35) を使うと，Y_l^m を表わす別の式

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-)^m c_l\sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!\,(l+m)!}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\sin^{m}\theta\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}(\cos\theta)^{l+m}}\sin^{2l}\theta \qquad (39)$$

が得られ，これは前の式と同値である．

$m=0$ のとき，これら二つの式は同じものになり，

$$Y_l^0(\theta,\varphi) = c_l\sqrt{\frac{1}{(2l)!}}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}(\cos\theta)^l}(1-\cos^2\theta)^l.$$

定数を除けば，これはルジャンドルの多項式 $P_l(\cos\theta)$ である (付録 B (71))．すなわち

$$Y_l^0(\theta,\varphi) = (-)^l\frac{c_l 2^l l!}{\sqrt{(2l)!}}P_l(\cos\theta)$$

$$= (-)^l\frac{c_l}{|c_l|}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta).$$

$Y_l^0(0,0)$ が正の実数であるという条件により，c_l の位相は

$$\frac{c_l}{|c_l|} = (-)^l$$

としなければならない．$Y_l^m(\theta,\varphi)$ を表わす式 (37) と (39) はこのようにして完全に決定された．

付録Bにあげた球面調和関数の性質の大部分は，圧縮された公式 (37) と (39) から直接に読みとられる．特に注目されるのは，

$$Y_l^{-m}(\theta,\varphi) = (-)^m Y_l^{m*}(\theta,\varphi)$$

であること，Y_l^m が $\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\sin^{|m|}\theta$ に $\cos\theta$ の多項式を掛けた積であり，この多項式の次数は $l-|m|$，偶奇性は $(-)^{l-|m|}$ であること，およびこの関数の偶奇性は $(-)^l$，すなわち

$$Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) = (-)^l Y_l^m(\theta,\varphi)$$

となることである (問題 4)．

III. 角運動量と回転

§ 10. 回転の定義. オイラーの角

この§10では，空間の回転がもついくつかの性質を振り返ってみる（《空間》という言葉は普通の意味に用いる）.

定義によると，与えられた点Oのまわりの回転とは，空間の点全体の移動のうちで，Oを動かさないものである．このような移動によって，空間の各点Pは新しい位置P′を占めるようになり，Pとその変換（像）P′とのあいだの対応は一対一である．われわれはまた，Oのまわりの回転とは空間の点のあいだの一対一の対応で，中心Oをそれ自体に対応させ，長さ（したがって角も）と三面角の向きとをともに保存するものであると定義することができる(7)(*).

長さ1のベクトル $\boldsymbol{u}$ と角 φ によって特殊な回転 $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varphi)$ が定められる．すなわち $\boldsymbol{u}$ によって定まる有向直線を軸とした大きさ φ の回転である（この軸のまわりの回転に対する正の向きは，普通の規約どおりに決めておく）．一つの回転をこのように言い表わす方法はただ一つではない．実際，$\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varphi)=\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}_1}(\varphi_1)$ となるためには，

$$\begin{cases}\boldsymbol{u}_1=\boldsymbol{u}\\ \varphi_1=\varphi+2n\pi\end{cases}\quad\text{または}\quad\begin{cases}\boldsymbol{u}_1=-\boldsymbol{u}\\ \varphi_1=-\varphi+2n\pi\end{cases}\quad(n\text{ は任意の整数})$$

となることが必要十分である．$\varphi=\varepsilon$ が限りなく小さいとき，この回転は無限小であるという．無限小回転 $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ によるベクトル $\boldsymbol{V}$ の変換（像）$\boldsymbol{V}'$ を書き表わすのはやさしい．すなわち

$$\boldsymbol{V}'\simeq\boldsymbol{V}+\varepsilon(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{V})\qquad(\varepsilon\ll 1).\tag{40}$$

回転を定めるもう一つの方法は，オイラーの角 α,β,γ を与えることである．一つの（右手系直角）三面角を $Oxyz$ とし，問題にしている回転をこれに適用して得られる三面角を $OXYZ$ とする．平面 OzZ に垂直な直線に一つの向きを定めて Ou とする（13·1図）．このときオイラーの角は

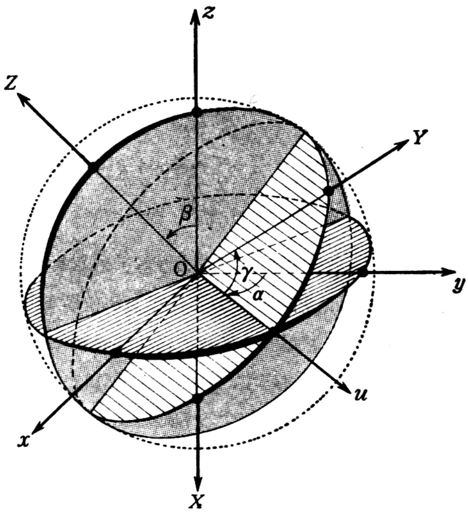
$$\alpha=(Oy,Ou),\qquad\beta=(Oz,OZ),\qquad\gamma=(Ou,OY)$$

であると定める．この回転はつぎに記す三つの回転を順に行なった結果得られるものであ

---

(7) 反対に，〔平面に関する〕鏡映は長さを保存するが，三面角の向きを逆にする.

(*) ［訳注］ 一平面上にない三つの半直線 OX,OY,OZ によって一つの三面角 $OXYZ$ が定まる．OX,OY,OZ の方向が右手の親指，人差し指，中指と一致するとき，この三面角は右手系または正の向きであるといい，左手のそれと一致するとき左手系または負の向きという．X,Y,Z の順序に注意せよ．



13·1図 オイラーの角の定義

る[8]：

i） Oz のまわりに角 α の回転 $\mathcal{R}_z(\alpha)$ （Oy が Ou にくる）

ii） Ou のまわりに角 β の回転 $\mathcal{R}_u(\beta)$ （Oz が OZ にくる）

iii） OZ のまわりに角 γ の回転 $\mathcal{R}_Z(\gamma)$ （Ou が OY にくる）.

この結果として生じる回転を $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ で表わし，

$$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathcal{R}_Z(\gamma)\mathcal{R}_u(\beta)\mathcal{R}_z(\alpha) \tag{41}$$

と書く．

角 α, β, γ は代数的な量であって，対応する回転が有向軸 Oz, Ou, OZ のまわりで正の向きであるか負の向きであるかにより，正または負の符号をとる．三面角 $Oxyz$ を一度選べば固定するとしても，同じ回転がいくつかの異なるオイラーの角の組によって定められることはありうる．$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathcal{R}(\alpha_1\beta_1\gamma_1)$ となるためには，

$$\begin{cases} \alpha_1 = \alpha + 2\pi n_\alpha \\ \beta_1 = \beta + 2\pi n_\beta \\ \gamma_1 = \gamma + 2\pi n_\gamma \end{cases} \quad \text{または} \quad \begin{cases} \alpha_1 = \alpha + \pi + 2\pi n_\alpha \\ \beta_1 = -\beta + 2\pi n_\beta \\ \gamma_1 = \gamma - \pi + 2\pi n_\gamma \end{cases} \tag{42}$$

（$n_\alpha, n_\beta, n_\gamma$ は任意の整数）

であることが必要十分である．

回転 $\mathcal{R}$ の一つ一つに，ある 3×3 行列を結びつけることもできる．その定め方はつぎのとおりである．一つの座標軸を選んで固定し，これにより定まる（右手系直角）三面角を $Oxyz$ とする．Ox, Oy, Oz 方向の単位ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ とすれば，当面の回転によって，これらはそれぞれ新しい三つのベクトル $\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2, \boldsymbol{A}_3$ に移され，右手系直角三面角 $OXYZ$ をつくる．ベクトル $\boldsymbol{A}_j$ はいずれもベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ の線形結合である[9]．すなわち

---

(8) ここで採用した定義は，ジャイロスコープの理論で普通に使われる定義とすこし違う．

(9) 本節を通じて，黙り添字に関する和の規約〔アインシュタインの規約，すなわち一つの項のなかに同じ添字が二度現われたときは，その添字を動かして和をとること〕を統一的に採用する．たとえば，

$$\boldsymbol{a}_i\mathcal{R}_{ij} = \boldsymbol{a}_1\mathcal{R}_{1j} + \boldsymbol{a}_2\mathcal{R}_{2j} + \boldsymbol{a}_3\mathcal{R}_{3j}.$$

$$A_j \equiv \mathcal{R}[a_j] = a_i \mathcal{R}_{ij}, \qquad \mathcal{R}_{ij} = (a_i \cdot A_j).$$

こうしてつくられた3個の線形結合の係数 $\mathcal{R}_{ij}$ は 3×3 行列の要素である．今後はこの行列を回転そのものと同じ文字 $\mathcal{R}$ で表わそう．この行列は回転を完全に定める．実際，座標軸 $Oxyz$ に関する座標 (V_1, V_2, V_3) によって定められる任意の空間ベクトルを $V \equiv a_j V_j$ とすれば，これは回転によってベクトル

$$V' \equiv \mathcal{R}[V] = A_j V_j = a_i \mathcal{R}_{ij} V_j$$

に変換される．このベクトルの $Oxyz$ に関する座標は

$$V'_i = \mathcal{R}_{ij} V_j \tag{43}$$

である．これは V の座標に行列 $\mathcal{R}$ を掛けることによって導き出される．

A_i は右手系直角三面角をつくるから，実行列 $\mathcal{R}$ は直交行列でユニモジュラ〔行列式が1であること〕である．すなわち，

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}^*, \qquad \tilde{\mathcal{R}} = \mathcal{R}^{-1}, \qquad \det \mathcal{R} = 1.$$

軸の三面角 $Oxyz$ を一度選んで固定しておけば，一つの回転に結びつく行列は一意的に定まる．逆に，任意の実直交ユニモジュラ行列にはただ一つの回転が対応する．

回転 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ に結びつく行列の要素はオイラーの角の関数として，具体的に書くことができ，その式は付録Cにある（付録 C，公式 (45)）．一例として，Oz のまわりの角 α の回転 $\mathcal{R}_z(\alpha)$ をとり，これによる上記のベクトル V の座標変換の法則を示せば，

$$\begin{aligned} V'_1 &= V_1 \cos\alpha - V_2 \sin\alpha \\ V'_2 &= V_1 \sin\alpha + V_2 \cos\alpha \\ V'_3 &= V_3 \end{aligned} \tag{44}$$

である．

二つの回転 $\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2$ の積，すなわちまず回転 $\mathcal{R}_1$ を施し，つぎにひき続き回転 $\mathcal{R}_2$ を施して得られる変換 $\mathcal{R} \equiv \mathcal{R}_2\mathcal{R}_1$ もまた一つの回転である．関係式 (41) によってこのような積の例が与えられている．$\mathcal{R}_1$ と $\mathcal{R}_2$ のオイラーの角の関数として $\mathcal{R}$ のオイラーの角を書き表わすのは容易でない．これに反して，対応する行列はきわめて容易に得られる．すなわち，$\mathcal{R}_1$ と $\mathcal{R}_2$ に対応する行列の積

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_2\mathcal{R}_1$$

である．

§ 11. 物理系の回転．回転演算子

物理の問題と関連して与えられた回転を論じるときには——以下に述べることはどのような空間の変換についてもあてはまるのであるが——われわれはつぎの二つの見方をとることができ，これらをはっきり区別しておく方がよい．第一は，問題の回転を座標軸に対

して施し，空間の各点Pと各点に結びついた物理量を動かさない立場である．第二は，座標軸を固定しておき，物理系そのものを回転させる立場である．これら二つの見方は同値である．すなわち，座標軸を回転させることと，物理系そのものを逆の向きに回転させることとは結局厳密に同じことになる．今後は特に断わらない限り第二の見方（物理系の回転）を採用しよう．

物理系の回転とは，どういう意味であるかを十分明確にしておく．量子論におけるこの概念の定義は古典論における定義よりも微妙である，というのは力学的状態と力学変数との関係がずっと間接的になっているからである．事柄を簡明にするために，まず1粒子について考えよう．この粒子のとりうる力学的状態をaとし，波動力学においてこの状態を表わす波動関数を$\psi(\boldsymbol{r})$とする．aにある一つの回転$\mathcal{R}$を施して得られる力学的状態をa'とし，これに対応する波動関数を$\psi'(\boldsymbol{r})$とする．すなわち，

$$a' \equiv \mathcal{R}[a], \qquad \psi'(\boldsymbol{r}) = \mathcal{R}[\psi(\boldsymbol{r})].$$

a'が状態aから回転$\mathcal{R}$によって導き出されるという意味は，状態a'にある系に対してどんな観測を行なったとしても，その観測の結果は，状態aにある系に対してなされた同じ観測が与える結果から，回転$\mathcal{R}$によって導き出されるということである．たとえば位置の測定を考えよう．状態aとa'に関する統計的分布はそれぞれ$|\psi(\boldsymbol{r})|^2$と$|\psi'(\boldsymbol{r})|^2$である．いま述べたばかりのことから，後者は前者から回転$\mathcal{R}$によって導かれる．言いかえると，与えられた点$\boldsymbol{r}$において後者の関数がとる値は，回転$\mathcal{R}$によって$\boldsymbol{r}$に移される点$\boldsymbol{r}_1$において前者の関数がとる値に等しい．すなわち

$$|\psi'(\boldsymbol{r})|^2 = |\psi(\boldsymbol{r}_1)|^2, \qquad \boldsymbol{r}_1 = \mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r}. \tag{45}$$

同様に，運動量空間においてそれぞれψとψ'に対応する波動関数を$\varphi(\boldsymbol{p})$と$\varphi'(\boldsymbol{p})$とすれば，

$$|\varphi'(\boldsymbol{p})|^2 = |\varphi(\boldsymbol{p}_1)|^2, \qquad \boldsymbol{p}_1 = \mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{p} \tag{46}$$

でなければならない．明らかに，これらの条件をすべて満たすためには，$\boldsymbol{r}$において関数ψ'がとる値が$\boldsymbol{r}_1$において関数ψがとる値に等しいこと，すなわち

$$\psi'(\boldsymbol{r}) \equiv \mathcal{R}[\psi(\boldsymbol{r})] = \psi(\mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r}) \tag{47}$$

であればよい．この関係はまた必要であることが示される(10)――このことを承認しておこう．こうして波動関数ははっきりと定められる．

関係 (47) はψとψ'とのあいだに一対一の対応を定める．明らかにこの対応は線形で

---

(10) 一般的な証明は第15章§6で与えられる．厳密に言えば，これらの条件によって関数ψ'は位相因数を除いて決まるにすぎない．位相の任意性が除かれるのは，のちに定義される演算子Rが回転群と同型な群をつくることを要求した場合である．ここではそれを要求しておく．

ある．言いかえれば，

$$\psi' = R\psi$$

となるような演算子 R が存在する．この演算子はユニタリである．なぜなら ψ と ψ' のノルムが等しいからである．すなわち

$$\int |\psi'(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int |\psi(\mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int |\psi(\boldsymbol{r}_1)|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1$$

(最後の積分を得るには，変数変換 $\boldsymbol{r}_1 = \mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r}$ を行ない，体積要素 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ が回転 $\mathcal{R}^{-1}$ によって保存されるということを使った)．

このことはすべて N 粒子系にも容易に一般化される．波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}^{(N)})$ は回転 $\mathcal{R}$ によって

$$\mathcal{R}[\psi(\boldsymbol{r}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{r}^{(N)})] = \psi(\mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r}^{(1)}, \cdots, \mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r}^{(N)}) = R\psi(\boldsymbol{r}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{r}^{(N)}) \tag{48}$$

に変換され，回転演算子 R は前と同様に線形でユニタリである．

一般に，与えられた物理系の任意の回転 $\mathcal{R}$ に対して，一つのユニタリ演算子 R が対応する．回転前の系の力学的状態を表わすベクトル $|a\rangle$ に $\mathcal{R}$ が作用すると，回転後の力学的状態を表わすベクトル $|a'\rangle$ が生じ，

$$RR^\dagger = R^\dagger R = 1 \tag{49}$$

$$|a'\rangle = R|a\rangle. \tag{50}$$

この変換法則から，密度演算子の変換法則が容易に導き出される．それにはこの演算子の定義自体を思い出せばよい．密度演算子 ρ によって系のある力学的状態（純粋な場合でも混合の場合でもよい）を表わし，この状態から回転 $\mathcal{R}$ によって生じる状態を密度演算子 ρ' で表わせば，

$$\rho' \equiv \mathcal{R}[\rho] = R\rho R^\dagger \tag{51}$$

が成り立つ．

§ 12. オブザーバブルの回転

本来の意味の物理系の回転のほかに，その観測を可能にするための装置についても回転を考えることができる．状態ベクトルの変換法則はすでに定めたから，そのつぎには系に加えられるいろいろな測定操作を表わすオブザーバブルの変換法則を定めなければならない．

一つのオブザーバブルを Q とし，回転 $\mathcal{R}$ による Q の変換(像)を $Q' \equiv \mathcal{R}[Q]$ とする．物理的には，オブザーバブル Q によって一つの測定操作が表わされ，Q から Q' への変換は，測定装置を一括して回転することに相当する．したがって状態 $|a\rangle$ にある系に対してなされる Q の測定結果の平均値は，状態 $|a'\rangle \equiv \mathcal{R}[|a\rangle]$ にある系に対してなされる

Q' の測定結果の平均値に等しい．すなわち

$$\langle a|Q|a\rangle = \langle a'|Q'|a'\rangle.$$

$|a'\rangle = R|a\rangle$ であるから，この関係は

$$\langle a|Q|a\rangle = \langle a|R^\dagger Q'R|a\rangle$$

と書かれる．この式は任意の $|a\rangle$ に対して成り立つはずであるから，

$$Q = R^\dagger Q'R,$$

すなわち

$$Q' = RQR^\dagger \tag{52}$$

が得られる（第7章，§5を参照）．

言いかえれば，回転 $\mathcal{R}$ に際してオブザーバブルは状態ベクトルと同じユニタリ変換によって変換される．

特にオブザーバブル S がスカラー量——すなわち回転による不変量[11]——を表わすとき，任意の R に対して

$$S' \equiv RSR^\dagger = S$$

という性質をもつ．R はユニタリであるから，この式はまた

$$[R, S] = 0 \tag{53}$$

と書き表わされる．すなわち回転によって不変なオブザーバブルはすべての回転演算子と交換する．

もう一つの特に興味のある場合は，ベクトル演算子の場合である．また§10の記号を使い，ベクトル演算子を $\boldsymbol{K}$，その成分を $K_i = (\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}_i)$ とする．演算子 K_1 すなわち Ox 方向の $\boldsymbol{K}$ の成分に回転 $\mathcal{R}$ を施して得られる演算子 K_1' は，OX 方向の $\boldsymbol{K}$ の成分である．もっと一般に，$\boldsymbol{a}' = \mathcal{R}[\boldsymbol{a}]$ のとき $\mathcal{R}[\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}] = (\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}')$ が成り立つ．特に

$$K_i' \equiv \mathcal{R}[K_i] = (\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{A}_i) = K_j\mathcal{R}_{ji}.$$

それゆえ $\boldsymbol{K}$ のデカルト成分の変換法則は

$$K_i' \equiv RK_iR^\dagger = \tilde{\mathcal{R}}_{ij}K_j \tag{54}$$

である．法則 (43) とは違って，ここに入ってきたのは，行列 $\tilde{\mathcal{R}}$ すなわち $\mathcal{R}$ の逆であり，行列 $\mathcal{R}$ そのものではないことに注意しよう．$\boldsymbol{K}$ の成分が回転 $\mathcal{R}$ によって変換される様子は，ベクトルの成分が回転 $\mathcal{R}^{-1}$ によって変換される様子と同じである．

---

[11] スカラーに対するこの定義は本章を通じて用いられる．あとになってわれわれは回転による不変量をスカラーと擬スカラーに分類する．前者は反転によって不変であるが，後者は反転の際 -1 を掛けられる．

§ 13. 角運動量と無限小回転

ここでわれわれは，一つの系の角運動量と無限小回転演算子とのあいだに関係をつけることができる．

まず§11で取り扱ったただ一つの粒子の場合をもう一度とりあげよう．法則 (47) によれば，Oz のまわりの角 α の回転 $\mathcal{R}_z(\alpha)$ は関数 $\psi(x, y, z)$ を

$$\mathcal{R}_z(\alpha)[\psi(x, y, z)] = \psi(x\cos\alpha + y\sin\alpha, -x\sin\alpha + y\cos\alpha, z)$$

に変換する ((44) を参照)．特に，無限小回転 $\mathcal{R}_z(\varepsilon)$ の場合，点 (x, y, z) の近くで右辺をテイラー展開し，ε について1位の項だけをとれば，

$$\begin{aligned} R_z(\varepsilon)\psi(x, y, z) &\simeq \psi(x+y\varepsilon, -x\varepsilon+y, z) \\ &\simeq \psi(x, y, z) + \varepsilon\left(y\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) \\ &\simeq (1-\mathrm{i}\varepsilon l_z)\psi(x, y, z) \end{aligned}$$

が得られる(*)．最後の行を出すには，微分演算子 l_z $(\hbar = 1)$ の定義をそのまま使っている．それゆえ，無限小回転演算子は

$$R_z(\varepsilon) \simeq 1 - \mathrm{i}\varepsilon l_z$$

という形に書かれる．同じ議論を $\boldsymbol{u}$ のまわりの無限小回転に適用すれば，

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) \simeq 1 - \mathrm{i}\varepsilon(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{u})$$

が得られる．N 粒子系に対しても結果は同じである．法則 (47) に基づいて行なったのが上記の計算であるが，同じことを法則 (48) について行なえばよい．その結果は

$$R_z(\varepsilon) \simeq 1 - \mathrm{i}\varepsilon L_z,$$

もっと一般に

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) \simeq 1 - \mathrm{i}\varepsilon(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{u})$$

であり，$\boldsymbol{L}$ は系の全角運動量である．

要約すれば，

系の全角運動量を $\boldsymbol{J}$ とするとき，任意の軸 $\boldsymbol{u}$ に沿う $\boldsymbol{J}$ の成分は，$\boldsymbol{u}$ のまわりの無限小回転演算子とつぎの関係によって結ばれる：

(*) [訳注] 文字 $\mathcal{R}$ は回転そのものを表わす．それゆえ $\mathcal{R}$ は点の位置ベクトル，空間内のベクトル，状態ベクトル(波動関数)，線形演算子などすべての幾何学的・物理的対象に作用し，その結果は $\mathcal{R}[\ \ ]$ で表わされる．特に状態ベクトル（波動関数）の線形演算子とみなすときは文字 R を用いる．したがって

$$\mathcal{R}[\psi] = R\psi.$$

($\mathcal{R}$ が座標空間におけるベクトルに作用するときは 3×3 型の行列であるが，これも $\mathcal{R}$ で表わす.)

$$\boxed{R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) \simeq 1-\mathrm{i}\,\varepsilon\,(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u}).} \tag{55}$$

系が類似の古典系をもたないときは，この基本関係が全角運動量の定義として利用される．

この定義が首尾一貫するためには，演算子 $(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})$ が確かにあるベクトル演算子 $\boldsymbol{J}$ の $\boldsymbol{u}$ 方向の成分になっていることを証明する必要がある．そのためには，無限小回転 $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ の一つ一つに，無限小回転演算子 $R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ が一つそしてただ一つだけ対応することを承認しさえすればよい[12]．実際，ベクトルの変換法則 (40) によると，演算 $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ は，ε に関する1次の項まで含めて，演算の積 $\mathcal{R}_x(\varepsilon u_x)\mathcal{R}_y(\varepsilon u_y)\mathcal{R}_z(\varepsilon u_z)$ に同値である．したがって

$$\begin{aligned} R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) &\simeq R_x(\varepsilon u_x)R_y(\varepsilon u_y)R_z(\varepsilon u_z) \\ &\simeq 1-\mathrm{i}\,\varepsilon\,(u_xJ_x+u_yJ_y+u_zJ_z). \end{aligned}$$

この定義により，すべてのスカラー演算子 S は $\boldsymbol{J}$ の成分と交換する（式 (53)）．すなわち

$$[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J}), S] = 0. \tag{56}$$

またこの定義から，$\boldsymbol{J}$ の成分と任意のベクトル演算子 $\boldsymbol{K}$ の成分との交換関係が導き出される．与えられた単位ベクトル $\boldsymbol{a}$ の方向の $\boldsymbol{K}$ の成分を $K_a \equiv (\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a})$ とする．定義から，回転 $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ による K_a の変換（像）は

$$K'_a \equiv R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)K_aR^\dagger_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) \simeq K_a-\mathrm{i}\,\varepsilon\,[J_u, K_a]$$

である．一方ではベクトル $\boldsymbol{a}$ の変換法則（式 (40)）により，

$$K'_a = (\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}') \simeq (\boldsymbol{K}\cdot[\boldsymbol{a}+\varepsilon\,(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{a})]).$$

これら二つの式において，ε の1次の項を等しいと置けば，

$$[J_u, K_a] = \mathrm{i}\,(\boldsymbol{K}\cdot(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{a})),$$

すなわち

$$\boxed{[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J}), (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{K})] = \mathrm{i}((\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{K})} \tag{57}$$

が得られる．$\boldsymbol{K}$ に演算子 $\boldsymbol{J}$ そのものを代入すれば，角運動量に固有の交換関係がもう一度見いだされる（式 (4)）．

上に述べた全角運動量の定義はつぎの定義と同値である：

一つの系が基本オブザーバブルとしてスカラー演算子の列 $S_1, S_2, \cdots$ およびベクトル演

(12) このことは，回転演算子の全体が〔空間の回転群と同型な〕群をつくるという仮定に相当する．

算子の列 $\boldsymbol{K}_1, \boldsymbol{K}_2, \cdots$ の成分をもつとき，この系の全角運動量 $\boldsymbol{J}$ とは，一つのベクトル演算子であり，その成分はすべての S と交換し，$\boldsymbol{K}$ の成分とは交換関係 (57) を満たすものであると定義する．

交換関係 (57) がベクトル列 $\boldsymbol{K}_1, \boldsymbol{K}_2, \cdots$ の一部分によってしか満たされないときには，たとえ角運動量演算子に特有の交換関係（4）が成り立っていても，$\boldsymbol{J}$ はこの系の全角運動量ではない．たとえば，§11 で取り扱った N 粒子の場合，個々の角運動量 $\boldsymbol{l}^{(i)}$ をいくつか加えて得られるベクトル演算子はいずれも関係（4）を満たす．しかしすべての $\boldsymbol{l}^{(i)}$ の和 $\boldsymbol{L}$ だけが全角運動量の定義にあてはまる．

§ 14. 演算子 $R(\alpha\beta\gamma)$ の構成

すべての有限な〔無限小でない〕回転は無限小回転の合成と見なすことができる．一つの有限な回転に対応する回転演算子は，対応する無限小回転演算子の積に等しい．後者は全角運動量の関数としてはっきり決まっているから（式 (55)），有限な回転演算子もすべて全角運動量の関数として表わされる．

回転 $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varphi)$ を考えよう．これは $\boldsymbol{u}$ 軸のまわりの無限小回転の合成である．特に

$$\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varphi+\mathrm{d}\varphi) = \mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\varphi)\,\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varphi)$$

が成り立つ．$J_u \equiv (\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})$ と置き，公式 (55) を適用すれば，上の式から

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varphi+\mathrm{d}\varphi) = R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\varphi)R_{\boldsymbol{u}}(\varphi) = (1-\mathrm{i}J_u\,\mathrm{d}\varphi)R_{\boldsymbol{u}}(\varphi),$$

すなわち

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}R_{\boldsymbol{u}}(\varphi) = -\mathrm{i}J_u R_{\boldsymbol{u}}(\varphi) \qquad (R_{\boldsymbol{u}}(0) = 1)$$

が得られる．この微分方程式は容易に積分され，

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varphi) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi J_u} \tag{58}$$

となる．

いま，オイラーの角 (α, β, γ) によって定められた回転 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ を考える．すでに§10 で学んだように，この回転は軸 $\mathrm{O}z, \mathrm{O}u, \mathrm{O}Z$ のまわりの回転の合成と考えられ，回転角はそれぞれ α, β, γ である（13·1 図）．それゆえ

$$R(\alpha\beta\gamma) = R_Z(\gamma)R_u(\beta)R_z(\alpha)$$

が成り立つ．(58) により，右辺にある三つの回転は角運動量の成分 J_Z, J_u, J_z の関数として表わされ，その結果

$$R(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma J_Z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta J_u}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha J_z}. \tag{59}$$

右辺にある三つの指数関数の順序には十分注意しなければならない．

この式を書き直して，座標軸方向の角運動量成分だけが現われるようにしよう．演算子

J_u は演算子 J_y から回転 $\mathcal{R}_z(\alpha)$ によって導き出されるから，演算子の変換法則 (52) により，

$$J_u = R_z(\alpha) J_y R_z^\dagger(\alpha) = e^{-i\alpha J_z} J_y e^{+i\alpha J_z}.$$

したがって

$$e^{-i\beta J_u} = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{+i\alpha J_z}.$$

この式を (59) の右辺に代入すれば，

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\gamma J_Z} e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y}$$

となる．同じように，J_Z は J_z から回転 $\mathcal{R}_z(\alpha)$ と $\mathcal{R}_u(\beta)$ を順に適用することによって導かれる．J_u に対して行なったのと同じような処理を J_Z に行なえば，最終の結果として

$$\boxed{R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}} \tag{60}$$

を得る．

§ 15. 2π の回転と半整数角運動量

(58) によれば

$$R_u(2\pi) = e^{-2\pi i J_u}.$$

u 軸のまわりの 2π の回転は確かにわれわれをもとの位置に戻すけれども，それに対応する回転演算子が必ずしも 1 に等しいとは限らない．実際，J_u を対角型にする表現においてこの演算子も対角型になるが，その対角要素は $+1$ または -1 であり，この符号は対応する J_u の固有値が整数であるか半整数であるかによって決まる．

J^2 の関数として一つのオブザーバブル D を導入し，j が整数であるか半整数であるかによって，Dの固有値は $+1$ または -1 に等しいと定める．

つぎのことに注意しよう：

i） $(1+D)/2$ は j が整数値をとる部分空間への射影子である．

ii） $(1-D)/2$ は j が半整数値をとる部分空間への射影子である．

iii） $D^2 = 1$.

iv） Dはすべての回転演算子と交換する：

$$[D, R] = 0.$$

こうすれば

$$R_u(2\pi) = D \tag{61}$$

であることがわかる．$R_u(2\pi) = 1$ が成り立つためには，角運動量が整数値しかとりえないということが必要である．これに反して

$$R_u(4\pi) = D^2 = 1$$

はつねに成り立つ．

実際には，無限小回転と限りなく1に近い演算子 R とのあいだに一対一の対応がある（定義 (55)）ということから，有限な回転についても同様であることはけっして出てこない．事実，一つの有限な回転を無限小回転の積の形で表わす方法は限りなく存在する．われわれがさきにつくった演算子 $R_u(\varphi)$ や $R(\alpha\beta\gamma)$ はそれぞれこのような形のうちの一つに当たる．もう一つ他の形が同じ演算子を与えないという先験的な根拠はすこしもない．

実は，有限な回転 $\mathcal{R}$ の一つ一つに対して，全部で二つの演算子 R' と R'' が対応し，これらは互いに《2π の回転》だけ異なるということが証明できるのである——ここではそれを承認しておこう．すなわち

$$R'' = DR'. \tag{62}$$

これまでに出会った物理系では，全角運動量は整数値しかとりえなかった．この場合は $D=1, R'=R''$ であるから，各回転 $\mathcal{R}$ に対してケットベクトルの回転演算子がただ一つだけ対応する．これに反して系が半整数角運動量をもつ状態をとりうるならば，演算子 R' と R'' が互いに異なる．

同じ回転を表わすのに二つの異なる演算子が用いられるという事実については，いくつかの注釈が必要である．ケットベクトルを 2π だけ回転したとき同じベクトルにならないということは，この回転の結果として測定可能な効果が生じない限り，なんら原理上の困難をひき起こさない．実際，測定装置の一つをあらかじめ 2π だけ回転させたからといって，実験結果を修正するわけにはゆかない．同じ位置を占める二つの同じ測定装置は必ず同じ答を与えるであろう．したがって，オブザーバブル Q が実際に測定できる量であれば，2π の回転に対して必ず不変である．もっと一般に，このオブザーバブルに一つの回転 $\mathcal{R}$ を施して得られるオブザーバブルは，この回転を行なうために通った特殊な道筋には関係しないはずである．すなわち

$$R'QR'^{\dagger} = R''QR''^{\dagger}.$$

さらに，2π の回転で変わらないという性質は，このいっそう一般な性質を確かめるのに十分である．この性質は

$$[D, Q] = 0 \tag{63}$$

という形にも書き表わされる．

定義によれば，オブザーバブルとは固有ベクトルの完全系をもつエルミート演算子である．物理量を表わす演算子はすべてオブザーバブルである：これは量子論が首尾一貫するために必要な条件である．しかしそれは逆も真であることをけっして要求してはいない．物理的に測定可能な量を表わすオブザーバブルを，物理的オブザーバブルと呼ぼう．いま述べたばかりの議論によって，すべての物理的オブザーバブルは必ず関係式 (63) を満た

す[13]．実際には，研究の対象となっている系のオブザーバブルはすべて物理的オブザーバブルであるという作業仮説がいつも暗黙のうちに認められている．この仮説はしばしば議論を簡単にするが，本質的なものではなく，理論の解釈をそこなわずに，この仮説をもっと制限の強い仮説に置き換えることもできる．関係 (63) は確かにこのような制限の一つである．この他の例は互いに区別できない多粒子の系に関連してのちに見いだされよう[14]．

詳しく調べても，量子力学の諸原理のうちに，半整数値をとる角運動量の存在と矛盾するものは何もない．実際にそれは自然のなかで観察されるのである．

§ 16. 既約な不変部分空間．回転を表わす行列 $R^{(J)}$

(60) によって，回転演算子はいずれも全角運動量の成分の関数であることが確かめられた．これはすでに§5の終りに述べたとおりである．それゆえ，§5でつくられた型の空間 $\mathcal{E}^{(J)}$[15]に属するベクトルは，回転によって同じ空間のベクトルに変換される．すなわち，空間 $\mathcal{E}^{(J)}$ は回転によって不変である．

その上さらに，この空間から任意に選んだベクトルを $|u\rangle$ とするとき，$|u\rangle$ から回転によって導き出されるベクトル $R|u\rangle$ の全体は，空間 $\mathcal{E}^{(J)}$ 全体を張る．この性質をもつ空間は回転に関して既約であると言われる．これと反対に，ある空間のなかから少なくとも一つのベクトル $|v\rangle$ を適当に選べば，$R|v\rangle$ の全体がこの空間の一部分しか張らないとき，この空間は回転に関して可約であるという．

$\mathcal{E}^{(J)}$ の既約性はつぎのようにして証明される．まず，ベクトル $R|u\rangle$ の全体が張る空間を $\mathcal{E}_1^{(J)}$ とする．$J_+|u\rangle$ は $\mathcal{E}_1^{(J)}$ に属する．実際

$$J_+|u\rangle \equiv (J_x+\mathrm{i}J_y)|u\rangle = \frac{1}{\varepsilon}(1-\mathrm{i}+\mathrm{i}R_x(\varepsilon)-R_y(\varepsilon))|u\rangle.$$

$J_-|u\rangle$ についても同じである．もっと一般に言って，$\mathcal{E}_1^{(J)}$ のベクトルに J_+ または J_- を適用して得られるベクトルはすべて $\mathcal{E}_1^{(J)}$ に属する．そこで展開式 $|u\rangle = \sum_M |JM\rangle\langle JM|u\rangle$ を考え，$\langle JM|u\rangle \neq 0$ となるような M の最小値を m とする．§5の構成法によれば，ベクトル $J_+^{J-m}|u\rangle$ は0でないベクトルで，$|JJ\rangle$ に比例する．したがって $|JJ\rangle$ は $\mathcal{E}_1^{(J)}$ に属する．ところが $|JJ\rangle$ に J_- を繰り返し適用することによって，すべてのベクト

(13) この本で取り扱う物理系に関する限り，そのオブザーバブルはすべて関係 (63) を満たす．この条件の下でオブザーバブルと物理的オブザーバブルを区別することは純理論の範囲を出ない．しかしながらオブザーバブルの全部が必ずしも関係 (53) を満たさない系を考えることはできる．その例の一つは問題15に与えられる．

(14) (63) の型の関係とその結果（超選択規則）に関する一般的な議論については，Wick, Wightman, Wigner, *Phys. Rev.*, 88 (1952) 101 を参照．

(15) 今後は大文字 J, M を用いて，全角運動量の量子数を表わす．

ル $|JM\rangle$ が導き出され，これらもまた $\mathcal{E}_1^{(J)}$ に属する．それゆえ $\mathcal{E}_1^{(J)}$ は $\mathcal{E}^{(J)}$ の基底ベクトルの完全列を含む．すなわちこれら二つの空間は一致する．　(証明終)

§6で指摘したように，一つの物理系のケットベクトルの空間は，$(2J+1)$ 次元の部分空間 $\mathcal{E}(\tau J)$ をいくつか合併してつくられる．τ が表わす量子数の集合によって，$\boldsymbol{J}^2$ の同じ固有値に対する空間が互いに区別されることを思い出そう．$\mathcal{E}(\tau J)$ の一つ一つが回転に関して既約な不変部分空間である．標準表現 $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ を使うと，これらの部分空間の一つ一つにおいて $\boldsymbol{J}$ の成分はごく簡単な行列によって表わされ，その行列は τ に依存しない．同じように，どの回転演算子 $R(\alpha\beta\gamma)$ も各部分空間 $\mathcal{E}(\tau J)$ において，ある $(2J+1)$ 次元の行列 $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$ によって表わされ，この行列は J に依存するが量子数 τ には依存しない．ここで，

$$R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma) \equiv \langle\tau JM|R(\alpha\beta\gamma)|\tau JM'\rangle \equiv \langle JM|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta J_y}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma J_z}|JM'\rangle \quad (64)$$

と定義する．これらの行列は演算子 $R(\alpha\beta\gamma)$ について特に便利な表現をつくり，状態ベクトルあるいはオブザーバブルの向きを変えることが必要になったときにはいつでも普通に用いられる．これらは回転を表わす行列と呼ばれる．これらの主な性質と，これらのうちいくつかのものの具体的な形は付録C（第IV節）にあげてある．

回転を表わす行列の定義そのものにより，部分空間 $\mathcal{E}(\tau J)$ の基底をつくる $(2J+1)$ 個のベクトルが与えられた回転 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ によって変換されるときの法則は

$$R(\alpha\beta\gamma)|\tau JM\rangle = \sum_{M'}|\tau JM'\rangle R^{(J)}_{M'M}(\alpha\beta\gamma) \quad (65)$$

となる．逆の性質を確かめることも容易である：

$(2J+1)$ 個のベクトル $|u_M\rangle$ $(M=-J, -J+1, \cdots, +J)$ が法則

$$R(\alpha\beta\gamma)|u_M\rangle = \sum_{M'}|u_{M'}\rangle R^{(J)}_{M'M}(\alpha\beta\gamma) \quad (66)$$

によって互いに変換されるならば，これらのベクトルは固有値方程式

$$\boldsymbol{J}^2|u_M\rangle = J(J+1)|u_M\rangle, \qquad J_z|u_M\rangle = M|u_M\rangle$$

を満たし，関係式 (24)—(25) にしたがって，J_+ と J_- の作用により互いに他のものから導き出される．

§ 17. 回転による不変性と角運動量の保存．回転の縮退

一つの量が回転に関して不変であるということは，いつでも角運動量の特殊な性質によって表わされる．実際，どんな回転でも無限小回転の積と考えられるから，一つの量がすべての回転に関して不変であるためには，無限小回転に関して不変であればよい．関係 (55) を通して，無限小回転に関して不変であるための条件には，角運動量が直接に入ってくる．

たとえば，波動関数またはケットベクトル $|\ \rangle$ が回転によって不変であるためには，

全角運動量のどの成分を適用しても 0 になること，すなわち

$$\boldsymbol{J}|\ \rangle = 0.$$

が必要十分である．実際には，

$$\boldsymbol{J}^2|\ \rangle = 0 \tag{67}$$

が成り立てば十分である．s 状態にある 1 粒子の波動関数の場合がこれである．この型の関数は変数 r だけに依存する．多粒子系の波動関数が，粒子間の相互距離あるいは粒子の位置ベクトルどうしがつくる角だけに依存する場合もこれである[16]．

同様に，オブザーバブル S が回転によって不変である（条件 (53)）ためには，これが角運動量の各成分と交換すること，すなわち

$$[\boldsymbol{J}, S] = 0 \tag{68}$$

が必要十分である．

回転によるハミルトニアンの不変性は特別な吟味に値する．実際，

$$\text{任意の } R \text{ に対して} \qquad [R, H] = 0 \tag{69}$$

ならば，運動方程式は回転によって不変である．すなわち，初期時刻にある回転によって互いに移りうる二つの状態ベクトルは，時間が経過してもこの性質を保つ．これはごく明らかなことである．実際，もし $|\psi(t)\rangle$ がシュレーディンガー方程式の解であるならば，どの R に対しても，

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)R|\psi(t)\rangle = R\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)|\psi(t)\rangle = 0$$

となるから，$R|\psi(t)\rangle$ もまたシュレーディンガー方程式の解である．

同様に，$|\ \rangle$ が H の固有ベクトルならば，これから回転によって導かれる任意のベクトル $R|\ \rangle$ も H の固有ベクトルであり，同じ固有値に対応する．言いかえると，H の各固有値の部分空間は回転に関して不変である．

運動方程式が回転によって不変である場合に生じる結果は，すべて関係

$$[\boldsymbol{J}, H] = 0 \tag{70}$$

から導かれる．この式は無限小回転による H の不変性を表わしている．

これらの関係が成り立つときには，演算子 $\boldsymbol{J}^2, J_z$ および H が互いに交換し，H の固有値問題を解くことがいちじるしく簡単になる．すなわち，$\boldsymbol{J}^2$ と J_z に共通な固有関数のなかから H の固有関数を探せばよい．その上，J の同じ値に対応するエネルギー・スペクトルは同じであり，M のとりうる $(2J+1)$ 個の値に対応する固有関数は，J_+ または J_- を繰り返し適用することによって，互いに他のものから導き出される．言いかえると，エネ

(16) このことを，加法定理の証明に役立つ性質 $(l+l')P_l(\cos\alpha) = 0$ と比較するがよい．

ルギーの固有値はMに無関係である．与えられたJの値に対応する固有値E_Jの一つ一つに，$(2J+1)$ 個の固有ベクトルから成る列が一つまたはいくつか対応し，同じ列に属するベクトルは，J_+またはJ_-を繰り返し適用することにより，互いに他のものから導き出され，回転に関して既約な不変部分空間を張る．この型の縮退を回転の縮退と名づける．

中心力場のなかの1粒子（第9章）の場合は，いま述べたことをすべてうまく説明する．明らかに，中心力場内の1粒子のハミルトニアンは回転により不変でなければならない．これが角運動量$\boldsymbol{l}$の三つの成分と交換することは直接にも確かめられる．第9章の解法は，$\boldsymbol{l}^2$とl_zに共通な固有関数で，固有値$l(l+1)$とmにそれぞれ対応するもの，すなわち

$$\chi_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$$

という形の関数のなかから，Hの固有関数を探すことにほかならない．このような問題はrに関する2階の微分方程式を解くことに帰着する．さらに，この方程式のなかにmは現われないから，これによって定められる動径関数の一つ一つを使って，同じ固有値に対するHの固有関数を全部で$(2l+1)$ 個つくることができる．

すでに指摘したように，この点に関しては，古典力学と量子力学とのあいだに驚くべき類似が認められる．ある古典系の運動方程式が座標系の任意の回転に対して不変であるとき，この系の全角運動量は保存される．この保存性から運動の第一積分が得られ，方程式の解法がいちじるしく簡単になる．同じように，量子力学においても回転に関する運動方程式の不変性から全角運動量の保存が導かれる．しかし，保存法則は古典力学の場合のように簡単な形では表わされない．角運動量の三つの成分が互いに交換しないからである．

IV. スピン

§ 18. 電子スピンの仮説

対応原理を単純に適用して得られる範囲に限れば，相対論的補正を考慮の外においても，シュレーディンガーの理論によって複雑な原子の性質を説明することはできない．これには二つの重要な修正を付け加える必要がある．しかもこれらの修正は古典力学からの類推によって予想しえないものである．一つは，シュレーディンガー方程式の解のうちから，電子の座標の置換に対していくつかのはっきり決まった対称性をもつ解だけを取り出すということである（パウリの原理）．これについては第14章で学ぶことにするが，いまのところ，これにはまったく触れないで議論が進められる．他の一つは電子スピンの仮説である．

この仮説を支える主な議論の根拠は，磁場内にある複雑な原子の挙動の研究である（ゼーマン効果，シュテルン=ゲルラッハの実験）．

Z 個の（スピンのない）電子をもつ原子のシュレーディンガー方程式はすでに書かれている（第2章（30））．核は限りなく重いと仮定すれば，核と重心とはつねに一致し，重心系によるこの原子のハミルトニアンは単に

$$H_0 = \sum_{i=1}^{Z}\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i}\right) + \sum_{i<j}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} \tag{71}$$

である．同じ原子がポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ による静磁場のなかに置かれたときのハミルトニアン H をつくるには，H_0 の式のなかの各 $\boldsymbol{p}_i$ を $\boldsymbol{p}_i - e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i)/c$ に置き換えればよい．特に，一様な磁場 $\mathcal{H}$ に関しては $\boldsymbol{A} = (\mathcal{H}\times\boldsymbol{r})/2$ であり，したがって

$$\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = \boldsymbol{p}^2 - \frac{e}{c}\{(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}) + (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A})\} + \frac{e^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2$$

$$= \boldsymbol{p}^2 - \frac{e}{c}(\mathcal{H}\cdot\boldsymbol{l}) + \frac{e^2}{4c^2}\mathcal{H}^2 r_\perp^2$$

となる．この式のなかで $r_\perp^2$ は，場 $\mathcal{H}$ に垂直な平面に下ろした $\boldsymbol{r}$ の射影の二乗を表わす．これにより，

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc}(\mathcal{H}\cdot\boldsymbol{L}) + \frac{e^2}{8mc^2}\mathcal{H}^2\sum_{i=1}^{Z} r_{i\perp}^2$$

となる．$\boldsymbol{L}$ は Z 個の電子の全角運動量である．すなわち，$\boldsymbol{L} \equiv \sum_i (\boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{p}_i)$．これから調べようとする諸現象においては，このハミルトニアンの式のなかで第3項の寄与はまったく無視することができる(17)．それゆえきわめてよい近似で

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc}(\mathcal{H}\cdot\boldsymbol{L}) \tag{72}$$

が成り立つ．

すべてのことは，あたかも各電子がその軌道を回りながら磁気モーメント

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2mc}\boldsymbol{l}$$

を誘導したかのように起こる．この磁気モーメントは角運動量に比例し，比例定数（磁気回転比）はこの効果に関する古典論が与える値 $e/2mc$ と正確に同じである．この仮説において，原子の全磁気モーメントは Z 個の電子の磁気モーメントの和，すなわち

(17) この項は原子の反磁性において主要な役割を果たす．その大きさは $(Ze^2/12mc^2)\mathcal{H}^2\langle r^2\rangle$ 程度と評価され，$\langle r^2\rangle \simeq 10^{-16}\,\mathrm{cm}^2$ であることが知られている．この大きさと，あとでわかる準位間距離 $e\hbar\mathcal{H}/2mc$ との比はおおよそ $10^{-9}Z\mathcal{H}$（ガウス）であり，場がごく強く原子がごく重い場合でもきわめて小さい量である．それゆえ，この項を無視したことが，のちに生じる矛盾に対して責任があるとはけっして考えられない．

$$\mathcal{M} = \frac{e}{2mc} L$$

に等しい．したがって，場 $\mathcal{H}$ 内の原子のエネルギーは，場のないときのエネルギーにくらべて磁気エネルギーの項 $-(\mathcal{M}\cdot\mathcal{H})$ だけ異なる．

H_0 が回転によって不変であり，したがって $\boldsymbol{L}$ の三つの成分と交換することを考慮に入れると，いくつかのきわめて注目すべき性質が，(72) の簡単な吟味から導き出される．

$\mathcal{H}$ の方向を z 軸にとる．$H_0, \boldsymbol{L}^2, L_z$ は共通な固有ベクトル $|nLM\rangle$ から成る完全列をもつ．これらに対応する H_0 の固有値 E_0^{nL} は M に無関係であり，$(2L+1)$ 重に縮退している[18]．

(72) により，H は H_0 と L_z の関数である．それゆえ H は同じ固有ベクトルの列をもち，ベクトル $|nLM\rangle$ の固有値は

$$E^{nLM} = E_0^{nL} - M\mu_B\mathcal{H} \tag{73}$$

である．ここで

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \qquad \text{（ボーア磁子）} \tag{74}$$

と置いている．M は $-L$ から $+L$ までのすべての値をとりうるから，この原子のスペクトルに属する各準位 E_0^{nL} は，場 $\mathcal{H}$ の影響によって $(2L+1)$ 個の準位に分かれ，これらは法則 (73) にしたがって等距離に分布する．そこでわれわれはつぎのような理論的予想に到達する (13·2 図)：

i) 原子のスペクトルの各準位 E_0^{nL} は，場 $\mathcal{H}$ の影響によって，等間隔な $(2L+1)$ 個の《多重線》に分かれる．

ii) これらは E_0^{nL} の両側に分布し，E_0^{nL} からの間隔の平均値は 0 である．

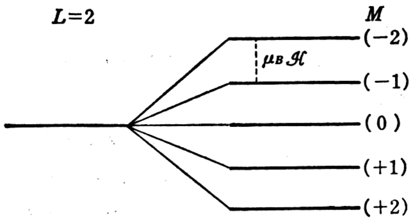
iii) 隣りあう二つの準位の間隔は $\mu_B\mathcal{H}$ という大きさであり，考えている原子には無関係で，$\mathcal{H}$ に比例する．

理論から得られたこれらの予想を実験によって確かめると，つぎの重要な二点が留保される：

a) Z が奇数の原子では，多重線がすべて偶数であり，すべてのことはちょうど L が

---

[18] たまたま，これらの固有値のうちのいくつかが一致する（水素原子において起こるように）とき，縮退はさらに増す．$E_0^{nL} = E_0^{n'L'}$ と仮定しよう．縮退の位数は $(2L+1)+(2L'+1)$ である．この場合，以下の議論は細部においていくらかの修正を受ける必要がある．それにもかかわらず，二つの量 L と L' のうちの大きい方をいたるところで L の代りに使えば，以下の議論から引き出される結論は正確に成り立つ．特に，ゼーマン《多重線》の一つ一つが等距離の準位を奇数個含むという結論は修正を要しない．



13・2図　D状態 ($L=2$) に対するゼーマン効果．左側は，場がないときのエネルギー準位；右側は，$\mathcal{H}\neq 0$ のとき，左側に対応する準位．

半整数であるかのように起こる．

b)　同一の多重線における隣りどうしの距離は $g\mu_B\mathcal{H}$ であり，因数 g (ランデの因子) は一つの多重線から他の多重線に移るとかなり大幅に変わりうる．

半整数の角運動量が存在することはシュテルン=ゲルラッハの実験 (第1章，§10) から直接明らかにされる．噴流をつくっている原子は事実上すべて基底状態にあるから，スクリーン上に観測される痕跡の個数は基底状態の多重度に等しい．銀の原子を使うと，全部で二つの痕跡が観測される．それゆえ銀原子の基底状態は角運動量1/2をもつ．もっと一般に，Zが奇数の原子は例外なく偶数個の痕跡をつくる．これは半整数の角運動量に特有の結果である．

a) と b) の二点は異常ゼーマン効果の研究によって同時に明らかにされる．一般にスペクトルのデータによって，相互に光学的遷移が行なわれる状態の多重度と，それぞれのランデ因子とを同時に決定することができる．

これらの困難を除くためには，半整数の角運動量，および $e/2mc$ とは異なる磁気回転比を理論に導入する必要が生じる．これは，電子スピンの仮説 (ウーレンベックとハウトスミット，1925) がきわめて簡明になしとげたことである．すなわち，

すべての電子は内部角運動量すなわちスピン $\boldsymbol{s}$ をもち，$\boldsymbol{s}$ の大きさは $\hbar/2$ (スピン1/2) であり，これに磁気モーメント

$$\boldsymbol{\mu}_s = g_s\frac{e}{2mc}\boldsymbol{s} \tag{75}$$

が結びついている．g_s は調整しうる定数とする．

$$g_s \simeq 2 \tag{76}$$

にとると，この理論は実験結果ときわめてよく一致する．

この g_s の値は電子の相対論 (第20章) によって説明することができる．

実験の示すところでは，核子すなわち陽子と中性子もまたスピン1/2をもつ．それは核子に結びついた磁気モーメントを測定することによって直接に検証される[19]．

本節の残りでわれわれはスピン1/2の粒子に関する非相対論 (**パウリの理論**) を展開する．

---

[19] 陽子 (proton) の磁気モーメント，スピン，および質量をそれぞれ $\boldsymbol{\mu}_p, \boldsymbol{s}_p, M_p$ で表わせば，↗

§ 19. スピン 1/2 とパウリ行列

スピン 1/2 の粒子の内部角運動量（すなわちスピンベクトル）を $\boldsymbol{s}$ とする．仮定により，$\boldsymbol{s}^2$ はただ一つの固有値 $s(s+1)=(1/2)(3/2)=3/4$ をもつ．各成分，たとえば s_z は二つの値 $+1/2$ または $-1/2$ のどちらか一方をとることができる．これらは縮退していないと仮定する．その結果，$\boldsymbol{s}^2$ と s_z に共通な二つの固有ベクトル

$$|+\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}\ +\frac{1}{2}\right\rangle, \qquad |-\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle$$

によって張られる 2 次元空間を考えれば，$\boldsymbol{s}$ の各成分はこの空間のなかで作用する演算子である．

$|+\rangle$ と $|-\rangle$ を基底にとれば，演算子 s_x, s_y, s_z を表わす行列は容易に書きおろされる．これらは行列 J_x, J_y, J_z の特殊な場合であり，その要素は (28) によって与えられる．

角運動量に特有な交換関係のほかにも，$\boldsymbol{s}$ の成分はつぎの注意すべき関係

$$s_x^2 = s_y^2 = s_z^2 = \frac{1}{4}, \qquad s_+^2 = s_-^2 = 0$$

を満たす．また

$$s_+^2 = (s_x + \mathrm{i}\,s_y)^2 = (s_x^2 - s_y^2) + \mathrm{i}(s_x s_y + s_y s_x)$$

であるから，

$$s_x s_y + s_y s_x = 0$$

が導かれる．それゆえ演算子 s_x, s_y, s_z は互いに反交換する[20].

$$\boldsymbol{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{77}$$

によって定義される<u>パウリ行列</u> $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ を導入するとつごうがよい．これらの具体的な形は

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

である．定義から主な性質が導き出されるが，それらは上の具体的な形からも容易に確かめられる．それらをつぎの式にまとめておく．

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \tag{78}$$

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = \mathrm{i}\sigma_z \tag{79 a}$$

↘

$$\mu_p = g_p \frac{e}{2M_p c} s_p$$

が成り立つ（(75) を参照）．中性子 (neutron) についても同様な式が得られる．実験によれば，$g_p = 5.59$，$g_n = -3.83$ である．

[20] 二つの演算子 A, B が $AB+BA=0$ を満たすとき，これらは反交換するという．

$$\sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = \mathrm{i}\sigma_x \tag{79 b}$$

$$\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = \mathrm{i}\sigma_y \tag{79 c}$$

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = \mathrm{i} \tag{80}$$

$$\mathrm{Tr}\,\sigma_x = \mathrm{Tr}\,\sigma_y = \mathrm{Tr}\,\sigma_z = 0 \tag{81}$$

$$\det\sigma_x = \det\sigma_y = \det\sigma_z = -1. \tag{82}$$

これらから重要な等式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}) + \mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})) \tag{83}$$

が導き出される（問題9）．ただし $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ は任意のベクトルである[21]．

$\boldsymbol{s}$ は角運動量であるから，回転 $\mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\varphi)$ に際して，この状態空間のベクトルに変換をひき起こす回転演算子 $R_{\boldsymbol{u}}^{(s)}(\varphi)$ は，公式（58）によって

$$R_{\boldsymbol{u}}^{(s)}(\varphi) \equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\sigma_u/2}.$$

ただし $\sigma_u \equiv (\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\sigma})$ である．〔右辺の〕指数関数を展開し，σ_u について偶数次の項と奇数次の項に分けて和をとり，関係式（(83) を参照）

$$\sigma_u^{2p} = 1, \qquad \sigma_u^{2p+1} = \sigma_u$$

を利用すれば，きわめて簡単な表現式

$$R_{\boldsymbol{u}}^{(s)}(\varphi) = \cos\frac{1}{2}\varphi - \mathrm{i}\sigma_u \sin\frac{1}{2}\varphi \tag{84}$$

が得られる．2π の回転演算子は -1 に等しく，§15の結果と一致することに注意する．

回転 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ を表わす演算子は，公式（60）により，

$$R^{(s)}(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\sigma_z/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\sigma_y/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\sigma_z/2} \tag{85}$$

である．これの具体的な形は $R_{\boldsymbol{u}}(\varphi)$ の場合と同じように計算される．結果は付録Cの公式（74）に譲る．

ここで考えた空間のベクトルは，普通の空間のベクトルとある種の類似点をもっている．後者は3個の成分をもつ幾何学的存在であり，はっきり決まった法則にしたがって互いに変換される．われわれがここで考えているベクトルについても同じことが言える（変換法則（85））けれども，3個の成分ではなく2個の成分をもつ点が違う．これらは**スピノール**と呼ばれる．

§ 20.　スピン1/2の1粒子のオブザーバブルと波動関数．スピノール場

スピン1/2の1粒子を考えよう．

---

[21] あるいは二つのベクトル演算子でも，それらの成分が $\boldsymbol{\sigma}$ の成分と交換するならば差しつかえない．この場合は，この等式の両辺における $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ の順序に注意する必要がある．たとえば，

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) + \mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})).$$

その基底変数は二つのカテゴリーに分けられる．一つは軌道の変数であり，もう一つは内部変数すなわちスピンの変数である．前者は位置 $\boldsymbol{r}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ の成分であり，基本交換関係 ($\hbar=1$)

$$[r_i, p_j] = \mathrm{i}\,\delta_{ij}$$

を満たす．後者はスピン $\boldsymbol{s}$ の成分であり，交換関係

$$[s_i, s_j] = \mathrm{i}\,\varepsilon_{ijk} s_k$$

を満たし，追加条件 $\boldsymbol{s}^2 = 3/4$ にしたがう．

軌道変数はスピン変数と交換するから，この粒子の状態空間 $\mathcal{E}$ は，軌道変数だけで定められる空間 $\mathcal{E}^{(0)}$ とスピン変数だけで定められる空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ とのテンソル積 $\mathcal{E}=\mathcal{E}^{(0)}\otimes\mathcal{E}^{(s)}$ である(第8章，§7を参照)．$\mathcal{E}^{(0)}$ はスピンのない1粒子の状態空間であり，$\mathcal{E}^{(s)}$ は前の§19でつくられた2次元空間である．

$\mathcal{E}$ のベクトルを表わすために，通常は $\boldsymbol{r}$ と s_z が対角型になるような表現をとる．このとき各ベクトル $|\psi\rangle$ は波動関数

$$\psi(\boldsymbol{r}, \mu) \equiv \langle \boldsymbol{r}\mu|\psi\rangle \tag{86}$$

で表わされる．これは連続な変数 $\boldsymbol{r}\equiv(x, y, z)$ ととびとびの変数 μ の関数であり，μ は s_z の固有値を表わし，全部で二つの値 $+1/2$ と $-1/2$ をとることができる．

この粒子の全角運動量は

$$\boldsymbol{j} \equiv \boldsymbol{l}+\boldsymbol{s} \tag{87}$$

である．実際，基底変数は全部で三つのベクトル演算子 $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{s}$ から成り，演算子 $\boldsymbol{j}$ がこれらの演算子とのあいだで全角運動量を特徴づける交換関係 (57) を満たすことは明らかである．なぜなら，$\boldsymbol{l}\equiv\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ は $\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{p}$ とこれらの関係を満たし，$\boldsymbol{s}$ と交換する．そして $\boldsymbol{s}$ は $\boldsymbol{s}$ そのものとこれらの関係を満たし，$\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{p}$ と交換するからである．

回転演算子 $R(\alpha\beta\gamma)$ はこれから容易に導き出される（式 (60)）．実際，$\boldsymbol{l}$ と $\boldsymbol{s}$ は交換するから，それは二つの交換する演算子の積

$$R(\alpha\beta\gamma) = R^{(s)}(\alpha\beta\gamma)R^{(0)}(\alpha\beta\gamma) \tag{88}$$

の形に書き表わされる．$R^{(s)}(\alpha\beta\gamma)$ は (85) によって定められ，スピン変数だけに作用し，スピンの回転をもたらす．$R^{(0)}(\alpha\beta\gamma)$ は

$$R^{(0)}(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta l_y}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma l_z}$$

によって定められ，軌道変数だけに作用し，通常の空間の回転をもたらす．

2π の回転に対しては，$R^{(0)}=1, R^{(s)}=-1$ であるから，このような回転によってケットベクトルはすべて符号を変える．しかしながら，基底オブザーバブルはすべて 2π の回転に対して不変であり，その結果，§15の議論によってそれらの物理的解釈に困難は生じない．

$$\psi\left(\boldsymbol{r}, \pm\frac{1}{2}\right) = \psi_{\pm}(\boldsymbol{r})$$

と置き，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, \mu)$ を2成分の波動関数

$$\psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_{+}(\boldsymbol{r}) \\ \psi_{-}(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}$$

の形に書き表わすのが多くの場合つごうがよい．$\boldsymbol{r}$ の値の一つ一つに対し，ψ は空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ のケットベクトルすなわち

$$\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle \equiv \psi_{+}(\boldsymbol{r})\,|+\rangle + \psi_{-}(\boldsymbol{r})\,|-\rangle \tag{89}$$

を表わす．言いかえれば，波動関数は一つのスピノール場とみなされる[22].

これらすべての考察をスピン1/2の Z 粒子系にまで拡張するのに困難は生じない．系全体の状態から成る空間は，個々に考えられた各粒子の状態空間のテンソル積である．特に，スピン空間は個々に考えられた Z 個のスピン空間のテンソル積として，2^Z 次元空間になる．このとき，個々に考えられた各スピンに対してパウリ行列 $\boldsymbol{\sigma}^{(i)}$ の系を導入する．スピン全体の集合の回転は全スピン

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{Z} \boldsymbol{\sigma}^{(i)} \tag{90}$$

によって表わされる．スピン集合の 2π の回転は演算子 $(-)^Z$ によって表わされる．

§ 21.　ベクトル場とスピン1の粒子

スピン場という概念と，ベクトル場というなじみ深い概念とのあいだにある平行性を強調しておくとつごうがよい．

$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ は一つの物理系の記述に関係したベクトル場であるとする．これは，たとえば電場や磁場でもよく，あるいはまたこれから考えるように，スピン1の1粒子の波動関数でもよい．

回転によるこの場の変換法則を調べよう．この物理系全体の回転 $\mathcal{R}$ によって場 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ が $\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r})$ に移るとする．すなわち

$$\boldsymbol{A}' = \mathcal{R}[\boldsymbol{A}].$$

点 $\boldsymbol{r}$ における場 $\boldsymbol{A}'$ を得るには，点 $\boldsymbol{r}_1 = \mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r}$ における場 $\boldsymbol{A}$ を表わすベクトル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_1)$ に

---

(22) 回転 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ によって，スピノール場 ψ は

$$\mathcal{R}[\psi] = R\psi = R^{(1/2)}\begin{pmatrix} \psi_{+}(\mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r}) \\ \psi_{-}(\mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}$$

に変換される．これは回転演算子を表わす式 (88) からただちに出る．$R^{(1/2)}$ は $J = 1/2$ に対する回転行列である．この変換公式はスカラー場に関する公式 (47) に比較されよう．ベクトル場に対しても類似の公式を得るが，$R^{(1/2)}$ のところが $R^{(1)}$ になる (§21 を参照).

回転 $\mathcal{R}$ を施せばよい．言いかえれば

$$A'_i(\boldsymbol{r}) = \mathcal{R}_{ij}A_j(\mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{r}) \qquad (i = x, y, z)$$

である（(43) と (47) を参照）．

たとえば，Oz のまわりの角 α の回転に対しては（(44)を参照），

$$\boldsymbol{A}' \equiv \mathcal{R}_z(\alpha)[\boldsymbol{A}], \qquad \boldsymbol{r}_1 \equiv (x\cos\alpha + y\sin\alpha, -x\sin\alpha + y\cos\alpha, z)$$

$$A'_x(\boldsymbol{r}) = A_x(\boldsymbol{r}_1)\cos\alpha - A_y(\boldsymbol{r}_1)\sin\alpha$$

$$A'_y(\boldsymbol{r}) = A_x(\boldsymbol{r}_1)\sin\alpha + A_y(\boldsymbol{r}_1)\cos\alpha$$

$$A'_z(\boldsymbol{r}) = A_z(\boldsymbol{r}_1).$$

特に，Oz のまわりの角 ε の無限小回転によって，

$$\mathcal{R}_z(\varepsilon)[\boldsymbol{A}] = (1 - \mathrm{i}\,\varepsilon(l_z + s_z))\boldsymbol{A} \tag{91}$$

が得られる．ここで l_z はさきに定義された微分演算子であり，s_z は

$$s_z\begin{pmatrix} A_x(\boldsymbol{r}) \\ A_y(\boldsymbol{r}) \\ A_z(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\,A_y(\boldsymbol{r}) \\ \mathrm{i}\,A_x(\boldsymbol{r}) \\ 0 \end{pmatrix}$$

で定義される演算子である．s_z は与えられた点における場の各成分を，同じ点における場の3成分の特殊な線形結合に変換する．ベクトル $\boldsymbol{A}$ を三つのデカルト成分 A_x, A_y, A_z によって定めると，s_z は行列

$$s_z = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

によって表わされる．演算子 s_x と s_y も同じようにして定められる．これらを表わす行列はそれぞれ

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad s_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

である．s_x, s_y, s_z が角運動量の成分に特有の交換関係を満たすことも確かめられる．この角運動量を $\boldsymbol{s}$ で表わし，その二乗を計算すると，

$$\boldsymbol{s}^2 = 2$$

となる．これは角運動量 $s = 1$ に相当する．$\boldsymbol{s}$ はベクトル場の内部角運動量あるいはスピンであると定義する．

$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ のような場はスピン1の1粒子を記述することができる．

$$A_i(\boldsymbol{r}) \equiv A(\boldsymbol{r}, i) \qquad (i = x, y, z)$$

と置けば，$A(\boldsymbol{r}, i)$ は位置変数だけではなく添字 i にも依存する波動関数であって，i は三つの値をとることができ，この粒子の向きを記述しうる内部変数になっている．この型の二つの波動関数の内積は

$$\langle B, A\rangle \equiv \sum_i \int B^*(\boldsymbol{r}, i)\,A(\boldsymbol{r}, i)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int(\boldsymbol{B}^*\cdot\boldsymbol{A})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{92}$$

である．

$\boldsymbol{l}$ のような演算子は位置変数だけに作用し，一方 $\boldsymbol{s}$ は内部変数 $\boldsymbol{i}$ に作用する．$\boldsymbol{l}$ と $\boldsymbol{s}$ は同じ変数に作用しないから，$\boldsymbol{l}$ と $\boldsymbol{s}$ が交換することは明らかである．z 軸のまわりの無限小回転演算子は (91) によって定められるが，同じ無限小回転演算子がどの軸のまわりにも得られる．定義 (55) を適用して，この粒子の全角運動量は

$$\boldsymbol{j} \equiv \boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}$$

であることがわかる (式 (87) を参照).

もっと一般に，ベクトル場に対する線形変換はいずれもある線形演算子の作用とみなされ，その演算子は三つの基底ベクトル演算子

$$\boldsymbol{r}, \qquad \boldsymbol{p} \equiv -\mathrm{i}\nabla, \qquad \boldsymbol{s}$$

の関数として表わされる．特に，重要な等式

$$\mathrm{rot} \equiv \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p} \tag{93}$$

が成り立つ．これは rot の定義を思い出し，上に述べた行列 s_x, s_y, s_z の具体的な形を使えば容易に確かめられる．

回転の内積，もっと一般に線形変換の内積という概念は，あらかじめ選ばれた表現に関係しない．波動関数 $A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{i})$ は，内部変数に関する基底ベクトルがそれぞれ三つの軸 $\mathrm{O}x, \mathrm{O}y, \mathrm{O}z$ 方向の単位ベクトルに対応するような表現において，この粒子の力学的状態を表わす．これらの基底ベクトル $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$ はそれぞれ s_x, s_y, s_z の固有ベクトルであり，固有値 0 に対応する (問題 10 を参照)．s_z の固有ベクトル $|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle$ を基底にとるのが多くの場合いっそう便利である．これらのベクトルはそれぞれ固有値 $+1, 0, -1$ に対応し，§6 に定義した標準法則によって互いに他のものから導き出される．この新しい表現において，s_x, s_y, s_z は関係式 (28) (ただし $j=j'=1$) を満たす行列によって表わされる．また，ベクトル場 $\boldsymbol{A}$ に結びつけられたケット $|\boldsymbol{A}\rangle$ は，定義 (式 (89) を参照)

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{A}\rangle \equiv A_+(\boldsymbol{r})\,|+\rangle + A_0(\boldsymbol{r})\,|0\rangle + A_-(\boldsymbol{r})\,|-\rangle$$

により，波動関数

$$A(\boldsymbol{r}, \mu) \equiv A_\mu(\boldsymbol{r}) \qquad (\mu = +, 0, -)$$

によって表わされる．ここで，

$$A_+ = -\frac{\sqrt{2}}{2}(A_x - \mathrm{i}A_y), \qquad A_0 = A_z, \qquad A_- = \frac{\sqrt{2}}{2}(A_x + \mathrm{i}A_y). \tag{94}$$

§ 22. スピンを含む原子内相互作用

固有磁気モーメントの存在により，電磁場のなかの電子のハミルトニアンは，スピンに依存する項を含む．

特に磁場 $\mathcal{H}(\boldsymbol{r})$ があるときは，対応原理が暗示するように，直接結合の項

$$-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathcal{H}(\boldsymbol{r}) \equiv -\mu_B \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathcal{H}$$

が現われる．$\boldsymbol{\mu}$ は (75)，(76) で定義された固有磁気モーメントである．

付け加えられる項はこれだけでない．場が単純な静電ポテンシャルになっている場合でさえ，明らかにスピン－軌道結合の項が存在するはずである．事実，純粋に静電的な場においても，電子は動きながら磁場を〈見る〉ので，この磁場が $\boldsymbol{\mu}$ と相互作用する．この古典的な議論はスピン－軌道結合を経験的に決めるときの手引きとして役立つ．しかし，ここでは相対論的効果（$v \ll c$ の極限では0に近づくもの）が関係してくるから，電子の相対論的方程式から出発する方が，なお精密であり確実である．この方程式からスピン－軌道相互作用を導き出すには，v/c によって展開し，0でない最低位の項だけをとればよい．この問題は第20章で検討されよう．球対称なポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかでは，このスピン-軌道相互作用は明らかに回転によって不変であるから，全角運動量 $\boldsymbol{j}$ の3成分と交換する．相対論によって与えられる表現式は

$$\frac{\hbar^2}{2\,m^2c^2}(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})\,\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \tag{95}$$

である．

同じ理由により，複雑な原子における Z 個の電子のハミルトニアン H_0 も，(71) で示したクーロン相互作用の項のほかに，スピン-軌道相互作用の項を含む．後者は全角運動量

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$$

とは交換するけれども，H_0 に含まれる他の項とちがって，$\boldsymbol{L}$ および $\boldsymbol{S}$ と個々には交換しない．また，全エネルギーに対するこれらの寄与は——ごく重い原子を除けば——相対的にきわめて小さいものであるとはいえ，これらの存在は原子スペクトルの性質を修正する（縮退をとり除く）ものであるから，無視することはけっしてできない[23]．

一様な磁場 $\mathcal{H}$ があるときに原子のハミルトニアン H をつくるには，場が0のときのハミルトニアン H_0 に，§18で述べたのと同じ手続きを施し，さらに直接磁気相互作用の項——$\sum_i \boldsymbol{\mu}^{(i)}\cdot\mathcal{H}$——を付け加える．スピンを考えない理論における式 (72) と同じように，$\mathcal{H}^2$ に比例する《反磁性項》を無視すれば，

$$H = H_0-\frac{e}{2mc}(\mathcal{H}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})) \tag{96}$$

を得る．

§ 23. スピンを含む核子－核子相互作用

スピンを含む相互作用の他の例として，二つの核子，すなわち中性子または陽子の相互作用を考える．核子の質量を M_0 とし，それらの相対位置を $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$，相対運動量を

(23) 話を完全にするためには，原子核が磁気モーメントをもつことによる修正（超微細構造）にも言及する必要があろう．

$\boldsymbol{p} = (\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2)/2$, スピンをそれぞれ $\boldsymbol{\sigma}_1/2$ と $\boldsymbol{\sigma}_2/2$ とする. 重心の運動は相対運動から完全に分離される. 今後問題になる力学的状態と力学変数は, 相対運動に関するものに限られる. 軌道角運動量は

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p},$$

全スピンは

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2), \tag{97}$$

全角運動量は

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} \tag{98}$$

である. ハミルトニアンは

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{M_0} + V$$

の形をしている.

回転によって不変な相互作用のうち, 最も多くの機会に問題となるのは,

$$V_1(r) \tag{99 a}$$

$$V_2(r)\,(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \tag{99 b}$$

$$V_3(r)\,(\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}) \tag{99 c}$$

$$V_4(r)\left(3\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})\,(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r})}{r^2} - (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)\right) \tag{99 d}$$

の四つの型である.

スピンを含む演算子はあとの三つの式に現われ, これらは伝統的な形式で書かれているが, これらを別の形に書きなおすことができる. たとえば, (97) の両辺を二乗して内積をとり, 等式 $\boldsymbol{\sigma}_1^2 = \boldsymbol{\sigma}_2^2 = 3$ を利用すれば,

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) = 2\boldsymbol{S}^2 - 3 \tag{100}$$

となる. (98) の両辺を二乗すれば,

$$(\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2) \tag{101}$$

となる. 最後に, (97) によって,

$$(\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{r})^2 = \frac{1}{4}((\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r}))^2 = \frac{1}{4}((\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})^2 + (\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r})^2 + 2(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})\,(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r}))$$

$$= \frac{1}{2}((\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})\,(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r}) + r^2).$$

ゆえに

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})\,(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r}) = 2(\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{r})^2 - r^2,$$

したがって

$$S_{12} \equiv 3\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})}{r^2} - (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{102}$$

$$= 2\left(3\frac{(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})^2}{r^2} - \boldsymbol{S}^2\right). \tag{102'}$$

演算子 S_{12} は《テンソル演算子》と名づけられ，相互作用 (99 d) は《テンソル力》と呼ばれる．

Vが (99) の型の相互作用の線形結合であるとき，ハミルトニアンは回転によっても，反転(*)によっても不変である (反転によって $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ はそれぞれ $-\boldsymbol{r}$ と $-\boldsymbol{p}$ に移り，スピン演算子は変わらない)．反転による不変性についてはあとにたち帰る機会があろう．ここでは，つぎのことを注意するだけにしておく．$\psi(\boldsymbol{r})$ を $\psi(-\boldsymbol{r})$ に移す演算子をPで表わせば，Pの固有関数は決まった偶奇性をもつ関数である．反転による〔Hの〕不変性は $[H, P]=0$ であることを意味する．ハミルトニアンがこの性質をもっているときには，その固有関数は偶奇性の決まった関数のなかから求められる．

(99) の相互作用は対称性の大きいものから順に並べてある．

最初のものはスピンを全然含まない．

二番目は$\boldsymbol{L}$および$\boldsymbol{S}$と個別的に交換する．すなわち，これは全体の回転に対して不変であるばかりでなく，空間だけの回転に対しても，スピンだけの回転に対しても不変である．Vが (99 a) と (99 b) 型の項だけから成るとき，Hの固有関数は $\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}^2, L_z, S_z$ に共通な固有関数のなかから求められる．その結果得られる固有値は回転の縮退を示し，その位数は $(2L+1)(2S+1)$ である．またそれらは L_z と S_z の固有値には無関係である．

Vがさらに (99 c) 型の項を含むとき，Hはやはり$\boldsymbol{L}^2$および$\boldsymbol{S}^2$と交換するが，空間だけ，あるいはスピンだけの回転に対しては不変でなくなる．その固有関数は $\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z$ に共通な固有関数のなかから求められ，固有値が示す回転の縮退は単に $(2J+1)$ 位である．

相互作用 (99 d) のもつ対称性は四つのなかで最も少ない．これは$\boldsymbol{L}^2$と交換しない．しかし$\boldsymbol{S}^2$とはやはり交換する．実際，これをテンソル演算子の形 (102′) で調べれば，明らかに $[\boldsymbol{S}^2, S_{12}]=0$ となる．Vが (99 d) 型の項を含むとき，Hの固有関数は $P, \boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z$ に共通な固有関数のなかから求められる．

(*) [訳注] 原語は réflexion となっているが $\boldsymbol{r}\to-\boldsymbol{r}$ は反転 (inversion) なので，そのように訳しておく．

V. 角運動量の合成

§ 24. 合成の問題

きわめて多数の問題において，系のハミルトニアンは回転に対して不変であり，その結果全角運動量$\boldsymbol{J}$の各成分と交換する．このとき，ハミルトニアンの固有解はJ^2とJ_zに共通な固有ベクトルのなかから求められる．それゆえどうすれば決まった角運動量（JM）をもつベクトルを数えあげ，構成できるかということはたいせつである．

中心力ポテンシャルのなかにあるスピンのない粒子（第9章）という簡単な場合には，全角運動量$\boldsymbol{J}$は単に軌道角運動量$\boldsymbol{l}$であり，全角運動量の固有関数は$\chi(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$の形をしている．一般の場合，$\boldsymbol{J}$は個々の角運動量の和

$$\boldsymbol{J}=\sum_i \boldsymbol{j}_i,$$

すなわち，系を構成する粒子の軌道角運動量とスピン角運動量の和である．一般に，個々の角運動量の固有ベクトルをつくることはできる．たとえば§22で取り扱った二つの核子から成る系の場合，

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{103}$$

であり，個々の角運動量の固有関数は$\phi(r)Y_l^m(\theta,\varphi)|\mu_1\rangle|\mu_2\rangle$という形をしている．ただし，核子1,2のスピンがそれぞれ上向きであるか下向きであるかによって，μ_1, μ_2は$+1/2$または$-1/2$の値をとる．それゆえ，これらの固有関数の線形結合によって，全角運動量の固有ベクトルから成る完全系をつくるということが問題になる．これが角運動量の合成の問題である．

§ 25. 二つの角運動量の合成に関する基本定理

最も簡単なのは二つの角運動量の合成問題である．$\boldsymbol{j}_1$と$\boldsymbol{j}_2$はそれぞれ別の系1,2の角運動量であるとする．これらを合わせてできる系を調べるために

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2$$

と置く．また，$\boldsymbol{j}_1^2, \boldsymbol{j}_2^2, j_{1z}, j_{2z}$に共通な固有ベクトル

$$|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \tag{104}$$

から成る完全系はすでにできていると仮定する．αは力学的状態を完全に指定するために必要な補助量子数の集合を表わす．あるいはもしその方がよければ，$\boldsymbol{j}_1^2, \boldsymbol{j}_2^2, j_{1z}, j_{2z}$とあわせて交換するオブザーバブルの完全集合をつくるようないくつかのオブザーバブルAの固有値の集合と考えてもよい．またこれらのオブザーバブルAは$\boldsymbol{j}_1$および$\boldsymbol{j}_2$の3成分と交換するとしておくことにする．さらにベクトル(104)は角運動量1と2に関して標準基底

をつくると仮定する．量子数の組 $(\alpha j_1 j_2)$ を一つ定めると，m_1, m_2 のとりうる値の範囲が定まり，異なる組 $(m_1 m_2)$ の個数と同じ個数のベクトルが対応する．これらのベクトルは§6の条件にしたがい，$j_{1\pm}$ あるいは $j_{2\pm}$ を繰り返し適用することによって互いに他のものから導き出され，全体として $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 次元の部分空間 $\mathcal{E}(\alpha j_1 j_2)$ を張る．

A, j_1^2 および j_2^2 が J と交換することに注意して，J^2 と J_z の固有ベクトルをこれら三つの演算子の固有ベクトルのなかから探し出す．この際に，各部分空間 $\mathcal{E}(\alpha j_1 j_2)$ を別々に取り扱うことができる．われわれは今後それらのうちの一つを考えよう．書き方を簡単にするために，この部分空間のベクトル $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ を $|m_1 m_2\rangle$ で表わし，全角運動量の固有ベクトルのうち，この部分空間のなかにあるものを $|JM\rangle$ で表わす（このためには，J と M が与えられれば全角運動量の固有ベクトルが定められることを前提としている；確かにそうなることはのちに示すであろう）．

この§25で考えるのは，組 (JM) のとりうる値と，その一つ一つに対する縮退の位数を決定することである．固有ベクトルの構成は§27で論じよう．

この問題の解決はつぎの二つの注意に基づいて行なわれる：

a)　各ベクトル $|m_1 m_2\rangle$ は J_z の固有ベクトルであり，対応する固有値は

$$M = m_1 + m_2$$

である．事実，$J_z = j_{1z} + j_{2z}$ であるから，$J_z|m_1 m_2\rangle = (m_1+m_2)|m_1 m_2\rangle$.

b)　J の値の一つ一つに対応して，全角運動量の線形独立な固有ベクトル $(2J+1)$ 個からなる列がいくつか定められる．列の個数を $N(J)$ とする．一つの列に属するベクトルは，J_+ または J_- を繰り返し適用することによって互いに他のものから導き出され，M のとりうる $(2J+1)$ 個の値 $-J, -J+1, \cdots, +J$ にそれぞれ対応する．

それゆえ[24]，固有値 M の縮退の位数を $n(M)$ で表わせば，

$$n(M) = \sum_{J \geqslant |M|} N(J),$$

したがって

$$N(J) = n(J) - n(J+1). \tag{105}$$

ゆえに $N(J)$ を得るには，M のとりうるすべての値に対して $n(M)$ を決めればよい．注意 a) により，$n(M)$ は単に

$$M = m_1 + m_2$$

となるような組 $(m_1 m_2)$ の個数にすぎない．これを数えあげるには，13·3図のような図

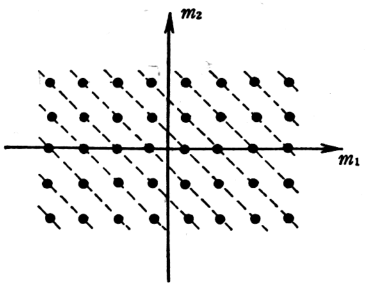
(24) 同じ論法が3次元調和振動子の問題（第12章，§15）においてすでに用いられている．

表を使えばわかりやすい．各組 $(m_1 m_2)$ は横座標 m_1，縦座標 m_2 をもつ点によって表わされ，$n(M)$ は対角線

$$x+y=M$$

の上にあるこのような点の個数である．具体的に考えるため $j_1 > j_2$ とすれば，

$$n(M)=\begin{cases} 0 & (|M| > j_1+j_2 \text{ のとき}) \\ j_1+j_2+1-|M| & (j_1+j_2 \geqslant |M| \geqslant |j_1-j_2| \text{ のとき}) \\ 2j_2+1 & (|j_1-j_2| \geqslant |M| \geqslant 0 \text{ のとき}). \end{cases}$$



13・3図　$M=m_1+m_2$ のとりうる値とその頻度 $n(M)$ を数えあげる $(j_1=7/2;\ j_2=2)$.

これらの数を関係式 (105) に代入すれば，

$$J=j_1+j_2, j_1+j_2-1, \cdots, |j_1-j_2| \quad \text{に対して}$$
$$N(J)=1$$

となる．

これから，**合成に関する基本定理（加法定理）**が得られる：

ベクトル $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ (α, j_1, j_2 は固定；m_1, m_2 は変数) によって張られる $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 次元空間において，

i）J のとりうる値は

$$j_1+j_2, j_1+j_2-1, \cdots, |j_1-j_2|^{(25)};$$

ii）そのような値の一つ一つに対応して，全角運動量に対する $(2J+1)$ 個の固有ベクトル $|JM\rangle$ から成る列がただ一つだけ定まる．

§ 26. 応 用 と 例

まず加法定理から得られるつぎの明白な結果の一つに注意する．

いくつかの角運動量を加えて得られる全角運動量は，半整数値をとる個々の角運動量の個数が偶数であるか奇数であるかによって，整数値または半整値をとる．

読者は以下のすべての例においてこの性質が確かに成り立つことを認めるであろう．

最初の例として，二つのスピン1/2の合成を考える．状態空間は4次元である．全スピン S は二つの値0と1をとることができる．

$S=0$ にはただ一つのベクトル $|00\rangle$ が対応する(*)．このときスピンは1重項状態に

---

(25) 言いかえると，J がとるのは，j_1+j_2+J が整数で，j_1, j_2, J が三角形の3辺となりうるようなすべての値である．

(*) ［訳注］ 一般には $|SM_S\rangle$ であるが，ここでは $S=M_S=0$ なので $|00\rangle$ となる．

あるという．

$S=1$ には三つのベクトル $|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle$ が対応する．これらは3重項状態の三つのベクトルである．

1重項および3重項状態への射影をそれぞれ P_0 および P_1 とする．これらを $\boldsymbol{S}^2$ あるいは $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$ の関数として書き表わすことはやさしい．実際，$\boldsymbol{S}^2=S(S+1)$ であるから，$\boldsymbol{S}^2$ は1重項状態で固有値0，3重項状態で固有値2をもつ．これから，

$$P_0=1-\frac{1}{2}\boldsymbol{S}^2=\frac{1}{4}\{1-(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\},\qquad P_1=\frac{1}{2}\boldsymbol{S}^2=\frac{1}{4}\{3+(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\}$$

が出る（等式（100）を参照）．したがって

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=P_1-3P_0 \tag{106}$$

であることがわかる．

第二の例はスピン1/2の1粒子の場合である．軌道角運動量 $\boldsymbol{l}$ とスピンとを加えて全角運動量 $\boldsymbol{j}$ が得られる．j は二つの値

$$j=l+\frac{1}{2},\qquad j=l-\frac{1}{2}$$

をとりうるが，$l=0$（s 状態）のときは別である．$l=0$ の場合，j はただ一つの値 $j=1/2$ しかとりえない．それゆえ j は1/2から $+\infty$ まですべての半整数をとることができる．その一つ一つに二つの項（すなわち $(2j+1)$ 個のベクトルから成る二つの列）が対応し，それらは逆の偶奇性をもつ．

最後の例として，§22の終りで取り扱った2核子系をもう一度とりあげる．

この場合は，三つの角運動量，つまり軌道角運動量と二つのスピンを加える必要がある（式（98））．まず二つのスピンを加えると，全スピン $\boldsymbol{S}$ が得られ，これがとりうる値は0と1の二つである．ついで相対座標系に関する角運動量 $\boldsymbol{L}$ を $\boldsymbol{S}$ に加える．L は0または正の整数値をすべてとることができる．値の組 (LS) の一つ一つに $(2S+1)(2L+1)$ 個のベクトルが対応し，これらの線形結合をつくることによって全角運動量の固有ベクトルが得られる．加法定理により，つぎのような J の値が得られる．

1重項状態：$S=0$　　$J=L$

3重項状態：$S=1$　　$\begin{cases} J=L-1,\ L,\ L+1 & (L\neq 0\ のとき) \\ J=1 & (L=0\ のとき)\end{cases}$

こうしてつくられた項を表わすために，つぎのようなスペクトル分析の記号が用いられる．すなわち，L の値を示すには大文字を用い，第9章§6で定めたのと同じ規約にしたがう．文字の左上には $2S+1$，つまり全スピンの多重度に等しい添字をつけ，右下には J に等しい添字をつける．たとえば，${}^3D_2$ は $L=2$，スピン3重，全角運動量 $J=2$ の項である．J の値の一つ一つに四つの項（すなわち全部で $4(2J+1)$ 個のベクトル）が対応

するが，$J=0$ は例外であって，これは二つの項をもつだけである．J の小さな値に対するいろいろな項を下に示す：

$$
\begin{array}{lllll}
J=0 & & {}^3P_0 & & {}^1S_0 \\
J=1 & {}^3S_1 & {}^3D_1 & {}^3P_1 & {}^1P_1 \\
J=2 & {}^3P_2 & {}^3F_2 & {}^3D_2 & {}^1D_2 \\
J=3 & {}^3D_3 & {}^3G_3 & {}^3F_3 & {}^1F_3
\end{array}
$$

さきに考えたスピン1/2の1粒子にも，同じ記号が適用される．この場合には，軌道角運動量を表わすのに小文字を用い——大文字は多粒子系の全軌道角運動量を表わすのにとっておく——左上の添字はただ取り除く．j の小さな値に対応する項を書けば，

$$
\begin{array}{lcccc}
j= & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} & \frac{5}{2} & \frac{7}{2} \\
 & s_{1/2}\,p_{1/2} & p_{3/2}\,d_{3/2} & d_{5/2}\,f_{5/2} & f_{7/2}\,g_{7/2}.
\end{array}
$$

§ 27.　全角運動量の固有ベクトル．クレプシュ=ゴーダン係数

加法定理によれば，与えられた組 $(J\,M)$ の一つ一つに，全角運動量の固有ベクトル $|\alpha\,j_1\,j_2 J\,M\rangle$ が一つ対応する．このベクトルを明確に決定するために，そのノルムは1であるとし，ある適当な規約によって位相を固定する．この規約にはあとでもう一度たち帰るであろう．ベクトル $|\alpha\,j_1\,j_2\,J\,M\rangle$ はベクトル $|\alpha\,j_1\,j_2 m_1 m_2\rangle$ と同様に，部分空間 $\mathcal{E}(\alpha\,j_1\,j_2)$ における直交規格化基底をつくる．一方から他方へ移るには，ユニタリ変換

$$
|\alpha\,j_1\,j_2 J\,M\rangle=\sum_{m_1 m_2}|\alpha\,j_1\,j_2 m_1 m_2\rangle\langle\alpha\,j_1\,j_2 m_1 m_2|\alpha\,j_1\,j_2 J\,M\rangle \qquad (107)
$$

による．

この変換の係数はきわめて重要な性質をもつ．すなわち，係数は α に無関係であり，j_1, j_2, J, m_1, m_2, M の大きさだけによって定まる．実際，部分空間 $\mathcal{E}(\alpha\,j_1\,j_2)$ において $|\alpha\,j_1\,j_2 m_1 m_2\rangle$ は標準表現の基底をつくる．それゆえ，この表現においては，$\boldsymbol{j}_1$ および $\boldsymbol{j}_2$ の成分が α に無関係な行列によって表わされる（(28) を参照)．したがって，$\boldsymbol{J}^2$ と J_z を表わす行列も α に無関係であり，これらに共通な固有ベクトルの成分 $\langle\alpha\,j_1\,j_2 m_1 m_2|\alpha\,j_1\,j_2 J\,M\rangle$ も同じ性質をもつ．それゆえ，これらの成分は純粋に幾何学的な性格のものである．すなわち，問題の角運動量はいくつかの力学変数1と2から構成されるが，上記の成分は角運動量とその向きだけによって定まり，力学変数の物理的性格には無関係である．これらは**クレプシュ=ゴーダン係数**（**C.-G. 係数**）あるいはベクトル結合係数と呼ばれる(*)．今後はこれらを記号 $\langle j_1\,j_2 m_1 m_2|J\,M\rangle$ で表わそう．この記号によれば，関係式 (107) は

(*) ［訳注］ ウィグナー (Wigner) 係数ということもある．

$$|\alpha j_1 j_2 J M\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J M\rangle \tag{108}$$

と書かれる.

C.-G. 係数を正確に定めるためには，ベクトル $|\alpha j_1 j_2 J M\rangle$ の位相を固定することが残されている．J の一つの値に対する $(2J+1)$ 個のベクトルの相対的な位相については，§6 の標準規約を採用する．こうするとベクトルは J によって変わりうる一つの位相を除いて定まる．この任意性を取り除くためには，$|\alpha j_1 j_2 j_1 J-j_1\rangle$ 方向の $|\alpha j_1 j_2 J J\rangle$ の成分 (*) が正の実数であるという条件，すなわち

$$\langle j_1 j_2 j_1 J-j_1|J J\rangle \text{ は実数} \geqslant 0 \tag{109}$$

という条件をつける.

C.-G. 係数の性質のうち大多数のものはその定義からただちに出てくる.

加法定理によれば，$\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle$ が 0 でないために必要な条件（選択規則）として，

$$m_1+m_2 = M, \qquad |j_1-j_2| \leqslant J \leqslant j_1+j_2$$

が同時に満たされなければならない.

すぐあとで示されるように，J の一つの値を与えたときの C.-G. 係数は，実係数の漸化式により，すべて係数 $\langle j_1 j_2 j_1 J-j_1|JJ\rangle$ から導き出される．最後に述べた係数は実にしてあるから，C.-G. 係数はすべて実数である.

さらに，これらはユニタリ変換の係数であるから，つぎの直交関係を満たす.

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J' M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{110 a}$$

$$\sum_{JM} \langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle\langle j_1 j_2 m'_1 m'_2|JM\rangle = \delta_{m_1 m'_1}\delta_{m_2 m'_2} \tag{110 b}$$

最も簡単な場合には，線形結合 (108) の係数を直接に決めることができる．まず，$J = j_1+j_2$, $M = J$ に対しては

$$|\alpha j_1 j_2\ j_1+j_2\ j_1+j_2\rangle = |\alpha j_1 j_2 j_1 j_2\rangle$$

が成り立つことに注意する．この等式の両辺に $J_- \equiv j_{1-}+j_{2-}$ を繰り返し適用することにより，$J = j_1+j_2$ に対応するベクトル $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ が全部つくられる．つぎに $J = j_1+j_2-1$ の列に属するベクトルを定めるには，$M = J$ に対応するものから始める．このベクトルはベクトル $|\alpha j_1 j_2\ j_1+j_2\ j_1+j_2-1\rangle$ に直交するという性質と，位相の条件 (109) によって確定する．これに J_- を繰り返し適用することにより，他のものがすべて導き出される．以下同様.

スピン 1/2 を二つ合成する場合，上のようにして全スピンの固有ベクトルが，個々のスピンの固有ベクトル $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-+\rangle$, $|--\rangle$ の関数として得られる．結果は

(*) [訳注] $|\alpha j_1 j_2 j_1 J-j_1\rangle$ は $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ において $m_1 = j_1$, $m_2 = J-j_1$ と置いたもの，$|\alpha j_1 j_2 JJ\rangle$ は $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ において $M = J$ と置いたものである.

つぎの表にまとめられる：

	$S=1$	$S=0$
$M=1$	$\|11\rangle=\|++\rangle$	
$M=0$	$\|10\rangle=\dfrac{\|+-\rangle+\|-+\rangle}{\sqrt{2}}$	$\|00\rangle=\dfrac{\|+-\rangle-\|-+\rangle}{\sqrt{2}}$
$M=-1$	$\|1-1\rangle=\|--\rangle$	

合成すべき角運動量がすこし複雑になると，もっとていねいな計算法に訴える必要が生じる．そのためにいろいろな漸化式（付録C (18)—(20)）がつくられている．特に，等式 (108) の両辺に J_+ または J_- を適用すれば，

$$\begin{aligned}\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\,&\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J\,M+1\rangle\\ &=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\,\langle j_1 j_2\, m_1-1\; m_2|J\,M\rangle\\ &\quad+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\,\langle j_1 j_2\, m_1\; m_2-1|J\,M\rangle \end{aligned}\tag{111}$$

$$\begin{aligned}\sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\,&\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J\,M-1\rangle\\ &=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)}\,\langle j_1 j_2\, m_1+1\; m_2|J\,M\rangle\\ &\quad+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)}\,\langle j_1 j_2 m_1\; m_2+1|J\,M\rangle \end{aligned}\tag{112}$$

が得られる（付録 C の (19) と (18) を参照）．$M=J$ のとき，(111) の左辺は0になる．そこでこの公式を適用すると，すべての係数 $\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J\,J\rangle$ はこのうちの一つ，たとえば $\langle j_1 j_2 j_1\; J-j_1|J\,J\rangle$ を何倍かして得られる．ベクトル $|\alpha\, j_1 j_2 J\,J\rangle$ の規格化条件 $(\sum_{m_1 m_2}\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J\,J\rangle^2=1)$ と位相の条件 (109) によって，上記の係数は決まってしまう．他の C.–G. 係数は，漸化式 (112) を繰り返し適用することによって，すべて上記の係数から導き出される．この計算法を利用して，ラカーは C.–G. 係数を簡潔な形（付録C (21)）に書き表わした[26]．

今までに述べた性質以外に，C.–G. 係数は注意すべき対称性をもち，これによって係数の表記がいちじるしく簡単になる．これらは付録C（第I節）においてC.–G. 係数の主な性質とともに示される．付録Cにはごく簡単な係数表も含まれている．

---

[26] この計算を最後までやりとげるためには，ラカーによるつぎの等式を用いなければならない：

$$\sum_s \frac{(a+s)!\,(b-s)!}{(c+s)!\,(d-s)!}=\frac{(a+b+1)!\,(a-c)!\,(b-d)!}{(c+d)!\,(a+b-c-d+1)!}$$

(a, b, c, d は整数で，$a\geqslant c\geqslant 0$，$b\geqslant d\geqslant 0$；s は $-c$ から $+d$ までのすべての整数値をとる)．

§ 28. 応用：2核子系

回転によって不変な系を取り扱うとき，角運動量の合成を応用する例として，§23 で考えた2核子系をもう一度とり上げる．スピンを含むいろいろな形のポテンシャルに対して，ハミルトニアンの固有値問題を調べよう．われわれは (99) の型のポテンシャルに限定する．

ポテンシャルVが

$$V = V_1(r) + V_2(r)\,(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$$

の形をしていると仮定する．この場合，ハミルトニアンは，$\boldsymbol{L}$および$\boldsymbol{S}$と交換し，固有関数は，スピン関数 $|S\mu\rangle$ と，はっきり決まった軌道角運動量 $(l\,m)$ をもつ$\boldsymbol{r}$の関数との積である．等式 (100) によれば，$S=0$ であるか1であるかによって，ポテンシャルは異なる値をとる．それゆえSのとりうる二つの値に対応して定まる中心力ポテンシャルのなかの（スピンのない）1粒子を考えれば，二つのシュレーディンガー方程式が得られるが，もとのシュレーディンガー方程式を解くことはこれら二つの方程式を解くことと同値である．$S=0$ のとき，固有関数の軌道部分はポテンシャル V_1-3V_2 内にある（スピンのない）1粒子の固有関数であり，$S=1$ のとき，ポテンシャル V_1+V_2 内にある1粒子の固有関数である．結局，この固有値問題は (LS) の値の各組に対する動径方程式に帰着する．

ポテンシャルが

$$V = V_1(r) + V_2(r)\,(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2) + V_3(r)\,(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})$$

の形をとるとき，ハミルトニアンは空間の回転に対してもスピンの回転に対しても個別的には不変でなくなるが，$\boldsymbol{L}^2$ および $\boldsymbol{S}^2$ とはつねに交換するから，$\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z$ に共通な固有解を求めることができる．(LSJ) の各組に対応して，ある型の関数が定まる．それがどのように角θ, φ およびスピン変数に依存するかは完全に定められ，具体的には C.-G. 係数を使ってつぎのように与えられる：

$$\begin{aligned}\Psi^M_{LSJ} &\equiv F(r)\,\mathcal{Y}^M_{LSJ}\\ \mathcal{Y}^M_{LSJ} &= \sum_{m\mu} Y^m_L(\theta,\varphi)\,|S\mu\rangle\langle LSm\mu|JM\rangle.\end{aligned} \tag{113}$$

たとえば $^1P_1$ 状態の三つの関数は《角に依存する部分》$\mathcal{Y}^M_{101} = Y^M_1|00\rangle$ $(M=0, \pm1)$ をもつ．$^3D_2$ 状態の五つの関数については，

$$\mathcal{Y}^M_{212} = \sum_{m\mu} Y^m_2|1\,\mu\rangle\langle 21m\,\mu|2M\rangle \qquad (M=0, \pm1, \pm2).$$

等式 (100) と (101) により，この型の関数に対するハミルトニアンの作用は

$$H\Psi^M_{LSJ} = \left[-\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r + \frac{\hbar^2}{M_0}\frac{L(L+1)}{r^2} + V_{LSJ}(r)\right]\Psi^M_{LSJ},$$

ただし

$$V_{LSJ}(r) = V_1(r) + [2S(S+1)-3]V_2(r) + \frac{1}{2}[J(J+1)-L(L+1)-S(S+1)]V_3(r)$$

である．それゆえシュレーディンガー方程式を解くことは，動径方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r + \frac{\hbar^2}{M_0}\frac{L(L+1)}{r^2} + V_{LSJ}(r)\right]F(r) = EF(r)$$

を解くことに帰着する．したがって，中心力ポテンシャルのなかの（スピンのない）1粒子の問題とまったく同じように取り扱われる．ただ一つの違いは，《有効中心力ポテンシャル》$V_{LSJ}(r)$ が組 (LSJ) によって異なる点である(27)．

最後に吟味する例は，ポテンシャルが

$$V = V_C(r) + V_T(r)S_{12}$$

の形をとる場合である．《テンソル》力があるために，ハミルトニアンは $\boldsymbol{L}^2$ と交換しない．しかし $\boldsymbol{S}^2$ とはつねに交換し，§23 で導入した《偶奇性》演算子 P とも交換する．したがって，$P, \boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z$ に共通な固有関数，すなわち決まった全角運動量 (JM) と決まった偶奇性と決まった S の値をもつ関数のなかから，H の固有関数を求めることができる．

$S=0$ のときは必ず $L=J$ である（したがって $P=(-)^J$）(*)．固有関数は必ず $F(r)\mathcal{Y}^M_{J0J}$ の形である．さらに，$\boldsymbol{S}|00\rangle = 0$ であるから，(102′) を調べると，明らかに

$$S_{12}\mathcal{Y}^M_{J0J} \equiv S_{12}Y^M_J(\theta,\varphi)|00\rangle = 0.$$

したがって，$F(r)$ はポテンシャル $V_C(r)$ 内にあって角運動量 J をもつ1粒子の動径方程式の解である．

$S=1$ で $P=(-)^J$ のときは必ず $L=J$ であり(**)，固有関数の《角に依存する部分》は，さきに述べた場合と同様に完全に定められる．すなわち $\Psi^M_{J1J} = F(r)\mathcal{Y}^M_{J1J}$．また $S_{12}\mathcal{Y}^M_{J1J} = 2\mathcal{Y}^M_{J1J}$ であることが示される（問題11）．したがって，$F(r)$ はポテンシャル $V_C(r)+2V_T(r)$ のなかにあって角運動量 J をもつ1粒子の動径方程式の解である．

$S=1$ で $P=(-)^{J+1}$ のときは，L のとりうる値は $J+1$ と $J-1$ だけである（ただし $J\neq 0$ とする．$J=0$ ならば $L=1$ 以外の値はない）．それゆえ固有関数は

---

(27) 実際，$S=0$ に対してはスピン-軌道力が0になり，どのような L と J についても，

$$V_{L0L} = V_1 - 3V_2.$$

また，$S=1$, $L=J$ のときは，《有効ポテンシャル》が L によらない．すなわち

$$V_{L1L} = V_1 + V_2 - V_3.$$

(*) ［訳注］ $Y^m_l(\theta,\varphi)$ の偶奇性が $(-)^l$ で表わされることは，第II節，§9の最後のところで調べたとおりである．

(**) ［訳注］ $S=1$ なので，J は $L, L\pm1$ のどれかに等しい．一方 P は $(-)^L$ で表わされるから，$J=L$ のときだけこれが $(-)^J$ に一致する．

$$\Psi \equiv F_{J-1}(r)\mathcal{Y}_- + F_{J+1}(r)\mathcal{Y}_+$$

の形である．ただし書き方を簡単にするため，$\mathcal{Y}_\pm \equiv \mathcal{Y}^M_{J\pm 11J}$ と置いた．$\mathcal{Y}_+$ あるいは $\mathcal{Y}_-$ に S_{12} が作用すると，これら二つの関数の線形結合が得られる（問題11）．したがって $(H-E)\Psi$ もまたこれら二つの関数の線形結合であり，その係数は r の関数である．$(H-E)\Psi=0$ と置くことは，これらの2係数を0にすることと同じである．こうして $F_{J-1}(r)$ と $F_{J+1}(r)$ に関する2階の微分方程式系が得られる．

具体的に説明するため，$J=1$ に対する一組の動径方程式系を書いてみる．重陽子の研究においてこの場合が見いだされる．波動関数は $^3S_1$ 状態と $^3D_1$ 状態の混合である．したがって

$$\Psi \equiv \frac{1}{r}u_S(r)\mathcal{Y}^M_{011} + \frac{1}{r}u_D(r)\mathcal{Y}^M_{211}$$

の形に書き表わされる．

$$\begin{aligned} &S_{12}\mathcal{Y}^M_{011} = \sqrt{8}\,\mathcal{Y}^M_{211}, \qquad S_{12}\mathcal{Y}^M_{211} = \sqrt{8}\,\mathcal{Y}^M_{011} - 2\mathcal{Y}^M_{211} \\ &L^2\mathcal{Y}^M_{011} = 0, \qquad L^2\mathcal{Y}^M_{211} = 6\mathcal{Y}^M_{211} \end{aligned} \tag{114}$$

が成り立ち（問題11），

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r + \frac{\hbar^2 L^2}{M_0 r^2} + V_C(r) + V_T(r)S_{12}$$

であるから，方程式 $(H-E)\Psi=0$ は

$$\begin{aligned} &\left[\frac{\hbar^2}{M_0}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + E - V_C(r)\right]u_S = \sqrt{8}\,V_T(r)u_D \\ &\left[\frac{\hbar^2}{M_0}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{6}{r^2}\right) + E + 2V_T(r) - V_C(r)\right]u_D = \sqrt{8}\,V_T(r)u_S \end{aligned} \tag{115}$$

と同値である．

§ 29. 三つ以上の角運動量の合成．ラカー係数．《3 sj》記号

§28で学んだ2核子系は，全角運動量が三つの個別的な角運動量の和となっている（式(103)）例である．この場合は三つの角運動量の合成のうちでも特に簡単なものであるから，これを研究するために，ごく高度の技巧を使わないでもよかった．いまから三つの角運動量を加える問題を一般的な形で検討する．

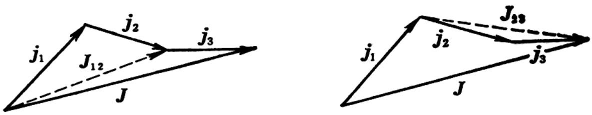
そこで三つの異なる系 1, 2, 3 がそれぞれ角運動量 j_1, j_2, j_3 をもつとし，それらを合わせてつくられた系を調べることにする．このとき全角運動量は

$$J = j_1 + j_2 + j_3$$

である．量子数 α, j_1, j_2, j_3 の確定値に対して，個々の角運動量の固有ベクトル

$$|\alpha j_1 j_2 j_3 m_1 m_2 m_3\rangle$$

は $(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)$ 個ある．これらのベクトルが張る空間において，全角運動



(a)　$j_1+j_2=J_{12}$
　　$J_{12}+j_3=J$

(b)　$j_2+j_3=J_{23}$
　　$j_1+J_{23}=J$

13・4 図　三つの角運動量のいろいろな結合法

量の固有ベクトルをつくることが合成の問題である．α の定義は§25で述べたとおりであり，以下の議論で何の役割も演じないから，今後はまったく除外してしまおう．

角運動量 (JM) のベクトルをつくるには，つぎの三つの手順をとることができる．

i）　まず j_1 と j_2 を合わせて $J_{12}=j_1+j_2$ をつくり，それから J_{12} と j_3 を合わせて J をつくる（13・4 図(a)）．こうして得られる固有ベクトルは

$$|(j_1j_2)J_{12},j_3;JM\rangle = \sum_{\substack{m_1m_2\\M_{12}m_3}} |j_1j_2j_3m_1m_2m_3\rangle\langle j_1j_2m_1m_2|J_{12}M_{12}\rangle\langle J_{12}j_3M_{12}m_3|JM\rangle \tag{116}$$

であって，$j_1^2, j_2^2, j_3^2, J_{12}^2, J^2, J_z$ に共通である．

ii）　まず j_2 と j_3 を合わせて角運動量 $J_{23}=j_2+j_3$ をつくり，それから j_1 と J_{23} を合わせて J をつくる（13・4 図 (b)）．こうして得られる固有ベクトルは

$$|j_1,(j_2j_3)J_{23};JM\rangle = \sum_{\substack{m_2m_3\\m_1M_{23}}} |j_1j_2j_3m_1m_2m_3\rangle\langle j_2j_3m_2m_3|J_{23}M_{23}\rangle\langle j_1J_{23}m_1M_{23}|JM\rangle \tag{117}$$

であって，$j_1^2, j_2^2, j_3^2, J_{23}^2, J^2, J_z$ に共通である．

iii)　まず j_1 と j_3 を合わせて J_{13} をつくり，それから J_{13} と j_2 を合わせて J をつくる．

このように，全角運動量の基底系としては，これら三つの異なる系からどれを選んでもよい．多くの問題において，一つの基底から別の基底に移ることができるとつごうがよい．この移行を表わす変換はユニタリ変換である．特に，

$$|j_1,(j_2j_3)J_{23};JM\rangle = \sum_{J_{12}} |(j_1j_2)J_{12},j_3;JM\rangle\langle(j_1j_2)J_{12},j_3J|j_1,(j_2j_3)J_{23}J\rangle. \tag{118}$$

明らかに，このユニタリ変換の係数は α に無関係である．その理由は，C.–G. 係数が α に無関係であるのと同じである．J_+ または J_- を (118) の両辺に適用すれば容易にわかるように，これはまた M にも無関係であるから，係数は6個の角運動量 $j_1, j_2, j_3, J_{12}, J_{23}, J$ だけによって決まる．

これらの係数をそのまま用いるよりも，ラカーの W 係数あるいはウィグナーの《6j》記号を使う方が便利である．これらは互いに比例し，つぎの関係によって定義される：

$$\langle (j_1 j_2) J_{12}, j_3 J | j_1, (j_2 j_3) J_{23} J \rangle = \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}\, W(j_1 j_2 J j_3 ; J_{12} J_{23})$$
$$= (-)^{j_1+j_2+j_3+J} \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{Bmatrix}.$$

定義そのものから，ウィグナー係数は四つのC.–G.係数の添字《m》に関する和の形に表わされる．ごく単純な議論の場合を除けば，これらの係数を直接に計算することは非常に骨が折れる．それは多くのC.–G.係数を計算し，さらにこれらの係数からつくられた複雑な式の計算をすることになる．ラカーはWに対して手ごろな表現式（付録C (36)）をつくるのに成功した．最もひろく行なわれる議論に役立つW係数の表がつくられている．

《$6j$》記号はWと符号だけしか違わない．何よりも興味をひくのはその注目すべき対称性である．

Wと《$6j$》の主な性質は付録C（第II節）まとめられている．

3個の角運動量の合成について上に述べたことは，もっと多くの場合すなわちn個の角運動量の合成

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 + \cdots + \boldsymbol{j}_n \tag{119}$$

にも一般化される．

もとの個別的な角運動量のうち二つを合わせて $\boldsymbol{j}_i + \boldsymbol{j}_k = \boldsymbol{J}_{ik}$ とすれば，(119) の右辺の $\boldsymbol{j}_i$ と $\boldsymbol{j}_k$ はそれらの和 $\boldsymbol{J}_{ik}$ に置き換えられ，問題は $(n-1)$ 個の角運動量の合成に帰着する．この操作を繰り返して，$(n-2)$ 個の角運動量の合成に帰着させ，以下同様である．このように全部で $(n-2)$ 個から成る中間の角運動量を導入しながら，n 個の角運動量をすっかり合成してしまう．こうして全角運動量の基底系がつくられる．

このようにしてつくられる基底系にはいくつか異なるものがある．$n=3$ のときには3個あることをすでに知っている．一般のnに対しては $n!/2$ 個あることが示される．一つの系から他の系へは（実係数）ユニタリ変換によって移る．容易に確かめられるように，この変換の係数は量子数αにも，$\boldsymbol{J}$の成分J_zの固有値Mにも無関係である．それゆえ係数を定める変数は，量子数 $J, j_1, j_2, \cdots, j_n$ のほかに，J_{ik} のような $(n-2)$ 個の量子数から成る二つの列だけである．この列によって，各基底系を特徴づける中間角運動量の大きさが与えられる．その結果，全部で $1+n+2(n-2)=3(n-1)$ 個の量子数《j》ができる．変換の係数は《$3(n-1)j$》記号の形で表わされ，これは3個の角運動量の合成に際して導入された《$6j$》記号の一般化になっている．《$3(n-1)j$》記号は $2(n-1)$ 個のC.–G.係数の添字《m》に関する和である．《$9j$》記号（4個の角運動量の和を表わす記号）の主な性質は付録C（第III節）に与えられている．

VI. 既約テンソル演算子[28]

§ 30. スカラー演算子の表現

一つのオブザーバブルが回転によって不変であるとき，その固有値の一つ一つに対する部分空間は回転に関して不変である．この注目すべき性質についてはすでに§17で述べておいた．§17で調べたオブザーバブルはハミルトニアンであったが，そこで問題になったことがスカラー・オブザーバブルの一般的性質であることは明らかである．

もっと一般に，与えられた標準表現において，スカラー・オブザーバブルは対角型でない場合でも，特に簡単な行列によって表わされる．

実際，標準表現 $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ の基底ベクトルを $|\tau JM\rangle$ とし（§6の記号），S はスカラー演算子であるとする（S がオブザーバブルであると仮定しなくてもよい）．仮定により

$$[\boldsymbol{J}, S] = 0.$$

したがって，ベクトル $S|\tau' J' M'\rangle$ はベクトル $|\tau' J' M'\rangle$ と同様に角運動量 $(J'M')$ をもつベクトルである．これは異なる角運動量をもつすべてのベクトルと直交する．それゆえ，$J \neq J'$ または $M \neq M'$ のとき，行列要素 $\langle \tau JM|S|\tau' J' M'\rangle$ は0である．さらに，$J = J'$ かつ $M = M'$ であるとき，J_+ は S と交換するから，

$$\begin{aligned}\langle \tau JM|S|\tau' JM\rangle &= [J(J+1)-M(M-1)]^{-1/2}\langle \tau JM|SJ_+|\tau' JM-1\rangle \\ &= [J(J+1)-M(M-1)]^{-1/2}\langle \tau JM|J_+S|\tau' JM-1\rangle \\ &= \langle \tau JM-1|S|\tau' JM-1\rangle\end{aligned}$$

が成り立つ．言いかえると，行列要素は M に無関係である．これら二つの性質は関係式

$$\langle \tau JM|S|\tau' J' M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} S^{(J)}_{\tau\tau'} \tag{120}$$

にまとめられる．ここで $S^{(J)}_{\tau\tau'}$ は J, τ, τ' だけで定まる量である．S がオブザーバブルである場合は，行列 $S^{(J)}_{\tau\tau'}$ がエルミートで対角化可能である．

§ 31. 既約テンソル演算子．定義

回転によって不変ではないが，回転による変換法則が特に簡単な演算子である既約テンソル演算子に対して，性質 (120) を拡張しよう．

テンソル演算子の概念はそれ自体ベクトル演算子の概念の一般化である．

まず**テンソル**の定義を与える．$\mathscr{E}_n$ は n 次元の空間で，そのベクトルは回転によって同

---

(28) 既約テンソル代数の体系的な解説と量子力学における角運動量理論への応用については，U. FANO, G. RACAH, *Irreducible tensorial sets*, Academic Press Inc., New York, 1959 を見よ．

じ $\mathcal{E}_n$ のベクトルに線形に変換されるものとする．このとき各回転にこの空間の線形演算子が一つ結びつけられる．この空間のベクトルを n 成分のテンソルと定義する．それゆえ，スピノール，普通の空間のベクトルはそれぞれ2成分および3成分のテンソルである．一つの量子系のケットベクトルから成る空間のベクトルは成分無限個のテンソルである．§6で定義された型の部分空間 $\mathcal{E}(\tau J)$ のベクトルは $(2J+1)$ 成分のテンソルである．

空間 $\mathcal{E}_n$ のなかに一つの基底系を選べば，上のように定義された各テンソルは n 個の成分によって表わされ，テンソルの回転はこれら n 個の成分に対する n 行 n 列の行列の作用によって表わされる．たとえば，普通の空間のベクトルは三つのデカルト座標によってしるしづけられ，その回転は§10で定義された一つの行列 $\mathcal{R}$ によって与えられる．また，$\mathcal{E}(\tau J)$ のなかに一つの標準表現を選べば，この空間の任意のテンソル $|u\rangle$ は $(2J+1)$ 個の成分 $u_M \equiv \langle\tau JM|u\rangle$ によって表わされ，回転 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ による変換の成分 u'_M は，回転行列 $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$ の適用によって導き出される（§16）．すなわち

$$u'_M = \sum_{M'} R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma)\, u_{M'}. \tag{121}$$

別の例として，ベクトル $\boldsymbol{V}$ の各成分とベクトル $\boldsymbol{W}$ の各成分との積の形で得られる9個の量 $V_iW_j\,(i, j = 1, 2, 3)$ を考える．これらは記号 $\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}$ によって表わされるテンソルの9成分である．回転 $\mathcal{R}$ による変換の成分は，

$$[\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}]'_{ij} \equiv V'_iW'_j = \mathcal{R}_{ik}\mathcal{R}_{jl}V_kV_l = \mathcal{R}_{ik}\mathcal{R}_{jl}[\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}]_{kl}$$

である．

われわれがつくりうるテンソルはきわめて多様であるが，そのなかでも**既約テンソル**は特別な役割を演じる．テンソルの定義されている空間 $\mathcal{E}_n$ が回転に関して既約であるとき，このテンソルは既約であると定義する．

普通の空間のベクトル，スピノール，空間 $\mathcal{E}(\tau J)$ のベクトルは既約テンソルである．

これに反して，テンソル $\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}$ は可約(*)である．事実，これが定義されている9次元空間は，回転によって不変な三つの既約部分空間の直和であり，部分空間の次元はそれぞれ 1, 3, 5 である．したがって，これらの各部分空間に対する $\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{W}$ の射影は既約テンソルである．すなわち定数を除けば，内積 $(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W})$ とベクトル $\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{W}$，および5成分をもつもう一つの既約テンソルであって，これは回転により2次の調和多項式のように変換される（付録B，§10を参照）[29]．

(*) ［訳注］ 既約でないテンソルを可約であると言う．

[29] このテンソルを表わすためにどんな表現を選ぶかによって，回転行列が異なるのは当然である．このテンソルが成分として

$$\frac{1}{2}(V_1W_2+V_2W_1), \quad \frac{1}{2}(V_2W_3+V_3W_2), \quad \frac{1}{2}(V_3W_1+V_1W_3)$$

$$V_1W_1-V_2W_2, \qquad 2V_3W_3-V_1W_1-V_2W_2$$

をもつように表現を選べば，これらは線形独立な多項式

$$xy, \quad yz, \quad zx, \quad x^2-y^2, \quad 2z^2-x^2-y^2$$

と同じ変換法則にしたがって互いに変換される．

§25で述べておいた $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 次元空間のベクトルもまた可約テンソルであって，$(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個の成分をもつ．これを既約な部分に分解する方法は加法定理によって与えられる．

テンソルの概念からテンソル演算子の概念に移る手続きは，ベクトルの概念からベクトル演算子の概念に移る場合と同じである．

n 個の演算子が回転によって互いに線形に変換され，その変換法則が空間 $\mathcal{E}_n$ 内の線形独立な n 個のベクトルと同じであるとき，これらは n 次元 **テンソル演算子** の成分である[30]．これら n 個の成分に対する線形変換により，別に新しく n 個の演算子がつくられるが，これらは異なる表現における同じテンソル演算子の成分とみなされる．空間 $\mathcal{E}_n$ が既約であるとき，このテンソル演算子は既約であると言われる．

ベクトル演算子は既約テンソル演算子のなかで特殊な一群をつくる．

$\boldsymbol{V}$ と $\boldsymbol{W}$ が二つのベクトル演算子であるとき，9個の演算子 V_iW_j は一つの可約テンソル演算子の成分である．この演算子は三つの既約テンソル演算子——スカラー $(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W})$，ベクトル $\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{W}$ のほか，たとえば脚注29に示した5成分によって定められるテンソル演算子——の直和である．

テンソル演算子を明確に定めるには，一定の表現において，回転による成分の変換法則を与えればよい．すなわち，

$(2k+1)$ 個の演算子 $T_q^{(k)}(q=-k,-k+1,\cdots,+k)$ が回転の際に

$$RT_q^{(k)}R^{-1}=\sum_{q'}T_{q'}^{(k)}R_{q'q}^{(k)} \tag{122}$$

という法則にしたがって変換されるとき，$T_q^{(k)}$ は k 位の既約テンソル演算子 $\mathrm{T}^{(k)}$ の標準成分であると定義する．

この変換法則は，既約 $(2k+1)$ 次元空間における標準表現の基底ベクトル $|kq\rangle$ が回転によって受ける変換の法則

$$R|kq\rangle=\sum_{q'}|kq'\rangle R_{q'q}^{(k)}$$

と同じである．

法則 (122) がすべての回転に対して成り立つためには，これがすべての無限小回転に対して成り立ちさえすればよい．無限小回転の場合には，演算子 R が法則 (55) によって与えられ，行列 $R^{(k)}$ はその定義 (64) から容易に得られ，法則 (122) は全角運動量の成分と $T_q^{(k)}$ とのあいだの交換関係

$$[J_\pm,T_q^{(k)}]=\sqrt{k(k+1)-q(q\pm1)}\,T_{q\pm1}^{(k)} \tag{123 a}$$

$$[J_z,T_q^{(k)}]=qT_q^{(k)} \tag{123 b}$$

---

(30) それゆえこの変換法則は，空間 $\mathcal{E}_n$ に一つの基底系をとるとき，$\mathcal{E}_n$ のベクトルの成分がしたがう変換法則と同じではない．また，同じ基底系に関しても，ベクトル演算子 $\boldsymbol{K}$ の成分の変換法則 (54) と，ベクトル $\boldsymbol{V}$ の成分の変換法則 (43) とは同じでない．特に，後述の法則 (122) と法則 (121) との違いに注意する．

と同値になる.

関係 (123) は関係 (23)—(25) と比較されよう. (123) によっても既約テンソル演算子 $\mathsf{T}^{(k)}$ の定義が与えられ, これは上に述べた定義と厳密に同値である.

$T_q^{(k)}$ が物理量を表わすときには, 2π の回転によって不変であることが必要である (§15を参照) から, k は必ず整数である. 今後は整の位数をもつ既約テンソル演算子に限って考える.

容易に示されるように, $(2k+1)$ 個の演算子

$$S_q^{(k)} \equiv (-)^q T_{-q}^{(k)\dagger}$$

は関係式 (123) を満たす (問題16). したがってこれらは, ある k 位の既約テンソル演算子の標準成分である. これを演算子 $\mathsf{S}^{(k)}$ とするとき, $\mathsf{S}^{(k)}$ と $\mathsf{T}^{(k)}$ は互いにエルミート共役であると定義する. すなわち

$$\mathsf{S}^{(k)} = \mathsf{T}^{(k)\dagger}$$

(k が整数であるから, エルミート共役をとる操作は相反的である).

スカラーは0位の既約テンソル演算子である. ベクトル演算子は1位の既約テンソル演算子である. 実際, ベクトル演算子のデカルト成分を K_x, K_y, K_z とするとき, その標準成分は

$$K_1^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(K_x+\mathrm{i}K_y), \quad K_0^{(1)} = K_z, \quad K_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(K_x-\mathrm{i}K_y) \qquad (124)$$

である [これらの関係式に現われる係数が, 関係式 (94) に現われたものと異なることに注意].

$(2k+1)$ 個の球面調和関数 $Y_k^q(\theta,\varphi)$ $(q=-k,\cdots,+k)$ を演算子とみなせば, k 位の既約テンソル演算子 $\mathsf{Y}^{(k)}$ の標準成分になっている.

§ 32. 既約テンソル演算子の表現. ウィグナー=エッカルトの定理

既約テンソル演算子の主な性質はつぎのウィグナー=エッカルトの定理によって与えられる:

標準表現 $\{J^2 J_z\}$ の基底ベクトルを $|\tau JM\rangle$ で表わす. このとき, 与えられた k 位の既約テンソル演算子 $\mathsf{T}^{(k)}$ の第 q 標準成分を表わす行列の要素 $\langle\tau JM|T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle$ は, クレプシュ=ゴーダン係数 $\langle J' k M' q|JM\rangle$ と, M, M', q に無関係な量との積に等しい.

すなわち

$$\langle\tau JM|T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2J+1}}\langle\tau J\|\mathsf{T}^{(k)}\|\tau' J'\rangle\langle J' k M' q|JM\rangle \qquad (125)$$

が成り立ち, $\langle\tau J\|\mathsf{T}^{(k)}\|\tau' J'\rangle$ はテンソル演算子によって異なる値をとり, 添字 τ, J, τ',

J' に依存する量である．これは縮小行列の要素と名づけられている（上の式に因数 $1/\sqrt{2J+1}$ を導入したのは，もっぱら便宜上の理由による）．

この定理を証明するために，$(2k+1)(2J'+1)$ 個のベクトル $T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle$ $(q=-k, \cdots, +k\,;\,M'=-J', \cdots, +J')$ を考え，これらのベクトルの線形結合

$$|\sigma J'' M''\rangle = \sum_{M'q} T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle\langle J' k M' q|J'' M''\rangle$$

をつくってみる．C.–G. 係数の直交関係（式（110 b））を使えば，明らかに

$$T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle = \sum_{J''M''}|\sigma J'' M''\rangle\langle J' k M' q|J'' M''\rangle. \tag{126}$$

ベクトル $T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle$ は必ずしも線形独立ではなく，その結果 $|\sigma J'' M''\rangle$ のうちいくつかが 0 になりうることに十分注意する．

関係式（123 a）と（24）によれば，

$$\begin{aligned} J_+ T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle &= [J_+, T_q^{(k)}]|\tau' J' M'\rangle + T_q^{(k)} J_+|\tau' J' M'\rangle \\ &= \sqrt{k(k+1)-q(q+1)}\, T_{q+1}^{(k)}|\tau' J' M'\rangle \\ &\quad + \sqrt{J'(J'+1)-M'(M'+1)}\, T_q^{(k)}|\tau' J' M'+1\rangle, \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} J_+|\sigma J'' M''\rangle = \sum_{M'q} T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle \{&\sqrt{k(k+1)-q(q-1)}\langle J' k M' q-1|J'' M''\rangle \\ &+ \sqrt{J'(J'+1)-M'(M'-1)}\langle J' k M'-1 q|J'' M''\rangle\}. \end{aligned}$$

C.–G. 係数のあいだの漸化式（111）によれば，右辺の括弧のなかは

$$\sqrt{J''(J''+1)-M''(M''+1)}\,\langle J' k M' q|J'' M''+1\rangle$$

に等しく，その結果右辺にベクトル $|\sigma J'' M''+1\rangle$ が現われる．詳しく書けば

$$J_+|\sigma J'' M''\rangle = \sqrt{J''(J''+1)-M''(M''+1)}\,|\sigma J'' M''+1\rangle.$$

同じような方法で，

$$\begin{aligned} J_-|\sigma J'' M''\rangle &= \sqrt{J''(J''+1)-M''(M''-1)}\,|\sigma J'' M''-1\rangle \\ J_z|\sigma J'' M''\rangle &= M''|\sigma J'' M''\rangle \end{aligned}$$

が示される．

これら三つの関係式から得られる結論として，J'' の一つの値に対する $(2J''+1)$ 個のベクトル $|\sigma J'' M''\rangle$ は，つぎの i）または ii）を満たす：

i） これらはすべて 0 である；

ii） これらは角運動量（$J'' M''$）をもつ（規格化されてはいない）固有関数であり，標準の規約によって互いに他のものから導き出される．

したがって，内積 $\langle\tau J M|\sigma J'' M''\rangle$ が 0 でない値をとる可能性があるのは，$J''=J$ かつ $M''=M$ の場合，つまり $(2J+1)$ 個の内積 $\langle\tau J M|\sigma J M\rangle$ だけである．その上，この内積の値は M に無関係である．このことから定理の結論がひき出される．なぜなら，

行列要素 $\langle \tau J M | T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle$ は

$$\langle \tau J M | T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle = \sum_{J'' M''} | \langle \tau J M | \sigma J'' M'' \rangle \langle J' k M' q | J'' M'' \rangle$$

と書き表わされるからである（式 (126)）． （証明終）

ウィグナー=エッカルトの定理から導かれる最も重要な結果の一つに，演算子 $T_q^{(k)}$ の選択規則がある．すなわち，行列要素 $\langle \tau J M | T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle$ が 0 でないためには，

$$q = M - M' \tag{127}$$

$$|J - J'| \leqslant k \leqslant J + J' \tag{128}$$

が同時に成り立つことが必要である．

これら二つの規則は等式 (125) の右辺に C.-G. 係数が現われることからただちに導かれる．実際上，特に有用なのはこれらの規則のうち二番目のものである．これは普通つぎの系の形に言い表わされる(31)：

$A^{(k)}$ が k 位の既約テンソル演算子の成分であるとき，決まった角運動量 J, J' をもつ二つのベクトルにはさまれた $A^{(k)}$ の行列成分は， k が不等式 $|J-J'| \leqslant k \leqslant J+J'$ を満たさない限り必ず 0 である．

§ 33. 応　　用

ウィグナー=エッカルトの定理は，原子および核物理学，特に β 放射の理論，電磁輻射の放出の理論，一般に角の相互関係に関するすべての問題において，きわめて多くの応用例をもっている．

応用例として原子核による電磁輻射の放出（γ 輻射）を考えよう．具体的に論じるために，励起状態 $\mathcal{N}^*$ にある核が基底状態 $\mathcal{N}$ への遷移を行ない，γ 線を放射すると仮定する．すなわち

$$\mathcal{N}^* \longrightarrow \mathcal{N} + \gamma.$$

核 $\mathcal{N}, \mathcal{N}^*$ のスピン（すなわち全角運動量）をそれぞれ J, J' とする．γ 輻射の理論が示すところによれば，γ 線が $\Omega = (\theta, \varphi)$ の方向に ν の偏りをもって放出される確率の振幅は，ある演算子 $H(\Omega, \nu)$ を始状態ベクトルと終状態ベクトルのあいだにはさんだ行列の要素

$$\langle \tau J M | H(\Omega, \nu) | \tau' J' M' \rangle$$

に比例する(32)．さらに $H(\Omega, \nu)$ は球面調和関数によって展開される．ここではこの展開

(31) この系に現われる成分 $A^{(k)}$ は，標準成分でなくてもよい．他の任意の成分，すなわち標準成分の線形結合もすべてこの性質をもつ．

(32) 第21章，§31 を参照．

の詳細に立ち入らない(33)が，結果は（偶奇性を異にする）二つの型の既約テンソル演算子，すなわち電気多重極モーメントと磁気多重極モーメントの級数になる．電気 2^l 重極モーメント $\mathrm{Q}^{(l)}$ は偶奇性 $(-)^l$ をもつ l 位の既約テンソル演算子であり，磁気 2^l 重極モーメント $\mathrm{M}^{(l)}$ は偶奇性 $(-)^{l+1}$ をもつ l 位の既約テンソル演算子である．多重極モーメントのうち最も多くの場合にみられるものをあげれば，

i）（普通の意味での）磁気モーメント：これは磁気2重極モーメント $\mathrm{M}^{(1)}$ である；

ii）（普通の意味での）4重極モーメント：これは電気4重極モーメント $\mathrm{Q}^{(2)}$ である．

テンソル演算子の選択規則によれば，0でない寄与をもたらすモーメントは，その極多重度が制限

$$|J-J'| \leqslant l \leqslant J+J' \tag{129}$$

のなかに入っているものに限る（このほかに，偶奇性の選択規則もあるが，ここでは触れない）．さらに，この選択規則を満たすモーメントの成分 $Q_m^{(l)}$ による寄与は，ウィグナー＝エッカルトの定理により，C.-G. 係数 $\langle J' l M' m | J M\rangle$ に比例する．これらをすべて求めるには，比例定数すなわち縮小行列の要素 $\langle \tau J \| \mathrm{Q}^{(l)} \| \tau' J'\rangle$ を知りさえすればよい．

それゆえ，選択規則にしたがう多重極モーメントの縮小行列要素が知られれば，遷移確率は完全に計算される．実際には，多重極による級数展開は早く収束し，意味のある寄与をもたらすのは，最も低位の一つまたは二つの多重極だけである．

静電磁場内の原子または核のエネルギー準位の移動を計算するときには，偶多重極モーメント $(\mathrm{M}^{(1)}, \mathrm{Q}^{(2)}, \cdots)$ もまた現われる．たとえば核と一様な磁場との相互作用によって，その磁気モーメントが観測され，核と一様でない電場との相互作用によって，その4重極モーメントが観測される．実際に測定されるのは，問題の核が見いだされる状態に対するこれらの演算子の平均値，つまり行列要素 $\langle \tau JM | M_m^{(1)} | \tau JM'\rangle$, $\langle \tau JM | Q_m^{(2)} | \tau JM'\rangle$ など，あるいは同じことであるが，縮小行列の対角要素

$$\langle \tau J \| \mathrm{M}^{(1)} \| \tau J\rangle, \quad \langle \tau J \| \mathrm{Q}^{(2)} \| \tau J\rangle, \quad \text{など}$$

である．$J=0$ のとき磁気モーメントは必ず0であり，$J=0$ または1/2のとき4重極モーメントは必ず0であることに注意する．もっと一般に，スピン J をもつ核の 2^l 重極モーメントは $2J<l$ のとき必ず0である．

演 習 と 問 題

1. $(2j+1)$ 個のベクトル

$$|\tau j \mu\rangle \qquad (\mu = -j, -j+1, \cdots, +j)$$

のあいだの関係 (24) と (25) から出発して，関係 (26) と (27) を証明せよ．

---

(33) J. Blatt, V. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1952, 第12章および付録Bを参照.

2. J_x と J_z が実（したがって対称）行列となるような表現においては，つねに J_y が純虚（したがって反対称）行列となることを示せ．

［注意；標準表現もこの部類に属する］．

3. 一つの演算子がある角運動量ベクトルの各成分と交換するためには，それらのうちの2成分と交換すれば十分である．このことを示せ．

4. 1粒子の軌道角運動量を $\boldsymbol{l}$，極座標角を θ および φ とし，《偶奇性演算子》を P とする．P は原点に関する反転をひき起こす演算子であり，関数 $F(\theta,\varphi)$ に対する作用は，$PF(\theta,\varphi)=F(\pi-\theta,\varphi+\pi)$ によって定められる．$[P,\boldsymbol{l}]=0$ であることを示せ．これから，球面調和関数がはっきり決まった偶奇性をもつこと，またその偶奇性は量子数 l だけによって定められることを導き出せ．それを決定せよ．

5. 空間の2ベクトル $\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'$ に対して，それらの極座標角をそれぞれ $\Omega\equiv(\theta,\varphi)$，$\Omega'\equiv(\theta',\varphi')$ とし，対応する角運動量演算子を $\boldsymbol{l},\boldsymbol{l}'$ とする．また $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ のあいだの角を $\alpha(0\leqslant\alpha\leqslant\pi)$ とする．すなわち $(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}')=rr'\cos\alpha$．ルジャンドルの多項式 $P_l(\cos\alpha)$ は，$\cos\alpha$ を媒介として，$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ の極座標角の関数である．偏微分方程式

$$\boldsymbol{l}^2 P_l(\cos\alpha)=\boldsymbol{l}'^2 P_l(\cos\alpha)=l(l+1)\,P_l(\cos\alpha)$$

$$(l_i+l'_i)\,P_l(\cos\alpha)=0 \qquad (i=x,y,z)$$

が成り立つことを示せ．これから加法定理

$$\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\alpha)\equiv Y_l^0(\alpha)\,Y_l^0(0)=\sum_{m=-l}^{+l}(-)^m Y_l^m(\Omega)\,Y_l^{-m}(\Omega')$$

を導け．

6. 三つの単位ベクトル $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}$ が右手系直交三面角をつくる．無限小回転

$$\hat{\mathcal{R}}\equiv\mathcal{R}_v^{-1}(\varepsilon)\,\mathcal{R}_u^{-1}(\varepsilon)\,\mathcal{R}_v(\varepsilon)\,\mathcal{R}_u(\varepsilon)$$

（第III節の記号）と $\mathcal{R}_w(-\varepsilon^2)$ との差は，ε^2 より高位の無限小であることを示せ．定義式(58)から出発して，無限小回転演算子 $\hat{R}$ を ε^2 の大きさまで直接に計算し，交換関係 $[J_u,J_v]=\mathrm{i}J_w$ を確かめよ．

7. 交換関係(56)を利用し，二つのベクトル演算子 $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ の内積 $(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\equiv A_xB_x+A_yB_y+A_zB_z$ は全角運動量の成分と交換することを示せ．

8. $\exp(-\mathrm{i}\beta J_y)=\exp\left(\frac{1}{2}\mathrm{i}\pi J_x\right)\exp(-\mathrm{i}\beta J_z)\exp\left(-\frac{1}{2}\mathrm{i}\pi J_x\right)$ であることを示せ．このことから，行列要素 $\langle JM|\exp(-\mathrm{i}\beta J_y)|JM'\rangle$ が変数 $\sin(\beta/2)$ と $\cos(\beta/2)$ に関して $2J$ 次の多項式であることを導け．

9. 等式 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$ を証明せよ［$\boldsymbol{\sigma}\equiv(\sigma_x\sigma_y\sigma_z)$ はパウリ行列；$\boldsymbol{A}$ および $\boldsymbol{B}$ は $\boldsymbol{\sigma}$ と交換するベクトル演算子であるが，$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ は必ずしも交換しなくてよい］．

10. $\boldsymbol{s}$ はスピン1の粒子の固有角運動量であるとする $(\boldsymbol{s}^2=s(s+1)=2)$．

i）任意の成分 $s_u=(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{u})$ に対して

$$s_u^3=s_u,\qquad \exp(-\mathrm{i}\varphi s_u)=1-\mathrm{i}\sin\varphi\, s_u-(1-\cos\varphi)\,s_u^2$$

が成り立つことを示し，回転の行列 $R^{(1)}(\alpha\beta\gamma)$ を具体的に書け．

ii)　$|z\rangle$ はノルム1のベクトルで $s_z|z\rangle=0$ とする．これを Oy のまわりに $+\pi/2$ だけ回転して得られるベクトルを $|x\rangle$，Ox のまわりに $-\pi/2$ だけ回転して得られるベクトルを $|y\rangle$ とする．つぎの関係式，および x, y, z の円置換によってそれらから導かれる式を証明せよ：

$$s_x|x\rangle=0, \qquad s_x|y\rangle=\mathrm{i}|z\rangle, \qquad s_x^2|y\rangle=|y\rangle,$$
$$s_x|z\rangle=-\mathrm{i}|y\rangle, \qquad s_x^2|z\rangle=|z\rangle.$$

これから，$|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$ が直交規格化基底をつくり，この基底に関して s_x, s_y, s_z を表わす行列は §21 に与えられたものであることを導き出せ．

iii)　$\langle i|R(\alpha\beta\gamma)|j\rangle=\mathcal{R}_{ij}(\alpha\beta\gamma)\quad(i, j=x, y, z)$

であることを示せ（§10 と §14 の記号）．

11.　2核子系の全スピンを $\boldsymbol{S}$ とする．演算子 $Q\equiv(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})^2/r^2$ が一つの射影子であることを示せ．これから，テンソル演算子 $S_{12}\equiv 2[3Q-\boldsymbol{S}^2]$ が等式 $S_{12}^2=4\boldsymbol{S}^2-2S_{12}$ を満たし，これがとりうる固有値は 0, 2, −4 だけであることを導け．

§28 で導入した角スピンの関数 $\mathcal{Y}_{LSJ}^{M}$ に対して，Q と S_{12} の作用を決定せよ．

[省略記号 $\mathcal{Y}^{(0)}\equiv\mathcal{Y}_{J0J}^{M}, \mathcal{Y}_0^{(1)}\equiv\mathcal{Y}_{J1J}^{M}, \mathcal{Y}_{\pm}^{(1)}\equiv\mathcal{Y}_{J\pm 1\,1\,J}^{M}$ を採用すれば，

$$Q\mathcal{Y}^{(0)}=0, \qquad (2J+1)\,Q\mathcal{Y}_{+}^{(1)}=J\mathcal{Y}_{+}^{(1)}+\sqrt{J(J+1)}\,\mathcal{Y}_{-}^{(1)},$$
$$Q\mathcal{Y}_0^{(1)}=\mathcal{Y}_0^{(1)}, \qquad (2J+1)\,Q\mathcal{Y}_{-}^{(1)}=\sqrt{J(J+1)}\,\mathcal{Y}_{+}^{(1)}+(J+1)\,\mathcal{Y}_{-}^{(1)}$$

となる]．

12.　スピン 1/2 の1粒子がある．与えられた軌道角運動量 $\boldsymbol{l}$ をもつ状態の空間において，演算子

$$\frac{l+1+(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\sigma})}{2l+1} \quad \text{および} \quad \frac{l-(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\sigma})}{2l+1}$$

は，それぞれ全角運動量 $j=l+1/2$ および $j=l-1/2$ をもつ状態への射影子であることを示せ．

13.　二つの等しい角運動量 $j_1=j_2=j$ を合成する．C.-G. 係数の対称関係を使わずにつぎのことを示せ：m_1 と m_2 との交換に対して，全角運動量の固有関数は対称（不変）であるか，または反対称（−1 が掛かる）であり，この対称に関する特性は J だけによって決まる．また，$(-)^{2j+J}$ が $+1$ に等しいとき対称，-1 に等しいとき反対称であることを示せ．

14.　演算子 A と角運動量の成分との関数 $\boldsymbol{J}^2\{A\}$ をつぎのように定義する：

$$\boldsymbol{J}^2\{A\}\equiv[J_x, [J_x, A]]+[J_y, [J_y, A]]+[J_z, [J_z, A]].$$

$\mathrm{T}^{(k)}$ が k 位の既約テンソル演算子であるとき，その成分は関係式

$$\boldsymbol{J}^2\{T_q^{(k)}\}=k(k+1)\,T_q^{(k)}$$

を満たす．このことを示せ．

15.　2次元等方性調和振動子の消滅および生成演算子を $a_r, a_r{}^\dagger\ (r=1, 2)$ とする：

$$[a_r, a_s]=[a_r{}^\dagger, a_s{}^\dagger]=0, \qquad [a_r, a_s{}^\dagger]=\delta_{rs}.$$

ここで

$$S = \frac{1}{2}[a_1{}^\dagger a_1 + a_2{}^\dagger a_2]$$

$$J_1 = \frac{1}{2}[a_2{}^\dagger a_1 + a_1{}^\dagger a_2], \qquad J_2 = \frac{1}{2}\mathrm{i}[a_2{}^\dagger a_1 - a_1{}^\dagger a_2], \qquad J_3 = \frac{1}{2}[a_1{}^\dagger a_1 - a_2{}^\dagger a_2]$$

と置く．J_1, J_2, J_3 はあるベクトル演算子 $\boldsymbol{J}$ のデカルト座標とみなされる［注意；第12章，§14 の記号によれば $L = 2J_2$］.

i）$\boldsymbol{J}$ は角運動量を特徴づける交換関係 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J} = \mathrm{i}\boldsymbol{J}$ を満たし，

$$\boldsymbol{J}^2 = S(S+1) \qquad (\text{したがって } [S, \boldsymbol{J}] = 0)$$

が成り立つことを示せ.

ii）今後 $\boldsymbol{J}$ をこの系の角運動量とみなし，$\boldsymbol{J}^2$ と J_3 の固有値をそれぞれ $j(j+1)$ および m で表わす．$\boldsymbol{J}^2$ と J_3 は交換するオブザーバブルの完全集合をつくり，j は負でない整数または半整数の値

$$j = 0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2,\ 2,\ \cdots,\ \infty$$

をすべてとりうることを示せ．ベクトル

$$[(j+m)!\,(j-m)!]^{-1/2} a_1{}^{\dagger j+m} a_2{}^{\dagger j-m}|0\rangle$$

は標準表現 $\{\boldsymbol{J}^2, J_3\}$ の基底になることを示せ.

iii）$a_1{}^\dagger$ と $a_2{}^\dagger$ がそれぞれある 1/2 位の既約テンソル演算子の $+1/2$ 成分と $-1/2$ 成分になっていること，したがって R を回転演算子 $R = \exp(-\mathrm{i}\alpha J_3)\exp(-\mathrm{i}\beta J_2)\exp(-\mathrm{i}\gamma J_3)$ とするとき，式 $Ra_r{}^\dagger R^{-1}$ $(r = 1, 2)$ は $a_1{}^\dagger$ と $a_2{}^\dagger$ の線形結合であることを示せ．この係数を決定せよ.

iv）上の結果を用いて，ウィグナーの公式（付録 C，(72)）その他付録 C にあげた行列 $R^{(j)}$ の主な性質を証明せよ（分解公式と合成公式を除く）.

16. $(2k+1)$ 個の演算子 $T_q^{(k)}$ $(q = -k, \cdots, +k)$ が交換関係 (123) を満たすならば，$(2k+1)$ 個の演算子 $S_q^{(k)} \equiv (-)^q T_{-q}^{(k)\dagger}$ も同じ性質をもつ．このことを示せ.

17. 積分 $\int Y_{l_1}^{m_1}(\theta,\varphi)\, Y_{l_2}^{m_2}(\theta,\varphi)\, Y_{l_3}^{m_3}(\theta,\varphi)\,\mathrm{d}\Omega$ は $(-)^{m_3}\langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_3 -m_3\rangle$ に比例し，比例定数は m_1, m_2, m_3 に無関係であることを示せ．この定数を決定せよ［この計算には問題 5 で証明された加法定理を用いよ］.

18. 《テンソル》演算子 $S_{12} \equiv 2\left[3\dfrac{(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})^2}{r^2} - \boldsymbol{S}^2\right]$ を $\boldsymbol{r}$ の関数とみなすとき，その値は角 θ, φ だけによって定まり，しかもこの対応は2位の球面調和関数を媒介にして行なわれる．このことを示せ.

$$\Bigl[\ S_{12} = \left(\frac{24\pi}{5}\right)^{1/2}\{S_-^2 Y_2^2 - (S_-S_z + S_zS_-)Y_2^1 + \sqrt{\frac{2}{3}}(3S_z^2 - \boldsymbol{S}^2)Y_2^0$$

$$+ (S_+S_z + S_zS_+)Y_2^{-1} + S_+^2 Y_2^{-2}\} = \left(\frac{24\pi}{5}\right)^{1/2}(\mathrm{S}^{(2)}\cdot\mathrm{Y}^{(2)})$$

が得られる．S_{12} は（付録 C，定義 (87) の意味で）2位の既約テンソル演算子 $\mathrm{S}^{(2)}$ と $\mathrm{Y}^{(2)}$ の内積であり，これらはそれぞれスピン変数と軌道変数に依存する］.

19. 与えられた方向に沿ってベクトル演算子 $\boldsymbol{K}$ の成分をとって K_u とし，同じ方向に

とった全角運動量 $\boldsymbol{J}$ の成分を J_u とする．また同じ部分空間 $\mathcal{E}(\tau J)$ (§16の定義) に属する二つのケットベクトルを $|\tau Ja\rangle$, $|\tau J b\rangle$ とする．

$$\langle\tau J\, a|K_u|\tau J\, b\rangle = \langle\tau J\, a|J_u|\tau J\, b\rangle\frac{\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}\rangle}{J(J+1)}$$

であることを示せ．ただし $\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}\rangle$ はこの部分空間におけるスカラー演算子 $(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K})$ の平均値，すなわち

$$\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}\rangle = \langle\tau J\, a|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K}|\tau J\, a\rangle$$

を表わす［換言すれば，$\mathcal{E}(\tau J)$ における $\boldsymbol{K}$ の行列要素は，その《射影》$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{K})/J(J+1)$ の行列要素と同じである］．

第14章　同種粒子系．パウリの排他原理

§1.　量子論における同種粒子

二つの粒子が同種であるというのは，これらの物理的性質が厳密に同じ場合である．それゆえ，どんな観測によってもこれらを互いに区別することはできない．このように同種粒子の見分けがつかないという性質は，古典理論では二義的な役割しか演じないけれども，量子論ではこれに反して，深刻な問題をひき起こす．

話を具体的に進めるため，二つの同種粒子の衝突を考え，これらの同種性が現象の記述にどのような影響をおよぼすかを調べる．

古典力学の法則にしたがう系を取り扱う限り，与えられた時刻における力学的状態は，粒子1の位置と運動量 $\xi^{(1)} \equiv (\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{p}^{(1)})$ および粒子2の位置と運動量 $\xi^{(2)} \equiv (\boldsymbol{r}^{(2)}, \boldsymbol{p}^{(2)})$ を与えることによって定められる．その時間的変化は，これら12個の変数を含む一つのハミルトン関数

$$H(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}) \equiv H(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{p}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, \boldsymbol{p}^{(2)})$$

によって定められる．たとえば，これら2粒子の相互距離だけで決まるポテンシャル $V(r)$ から導かれるもののほかには，どんな力も働いていないとき，粒子の質量を m とすれば，

$$H(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}) = \frac{\boldsymbol{p}^{(1)2}}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}^{(2)2}}{2m} + V(|\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(2)}|) \qquad (1)$$

が得られる．

2粒子は同種であるから，これらを置換するとき，すなわち粒子1に粒子2の力学的状態を与え，粒子2に粒子1の状態を与えるとき，系の力学的性質が修正を受ける理由はまったくない．特に，関数 H はこのような置換に対して不変である．すなわち

$$H(\xi', \xi'') = H(\xi'', \xi'). \qquad (2)$$

他方，各瞬間における系の状態は，変数1と2の置換を除いて知られるにすぎない．つまり，与えられた時刻にこの系を観測すれば，一つの粒子がある状態 ξ' にあり，もう一つの粒子が別の状態 ξ'' にあることは示されるけれども，ξ' に見いだされたのは粒子1で，ξ'' のは粒子2であるとか，またはその逆であるとか断言することはできない．ここに一つの困難があるように見えるが，これは単に見掛け上のものである．実際，時刻 t_0 に一つ

の粒子が状態ξ'_0に，もう一つが状態ξ''_0に見いだされたとする．ξ'_0に見いだされたのが粒子1であるか粒子2であるかによって二つの可能性が生じる．しかし，これら二つの可能な初期条件にはただ一つの同じ物理現象が対応する．関数Hの対称性（2）によって，時刻t_0にそれぞれξ'_0, ξ''_0にあった粒子の運動法則$\xi'(t), \xi''(t)$は，事実これら二つの場合に対して同じである．ξ'_0から出発した方を1と呼び，ξ''_0から出発した方を2と呼ぶか，またはその逆の呼び方をするかは単に便宜上の問題である．

この2粒子系が量子力学の法則にしたがうときには事情が異なる．さきほどの分析のはじめの方は一語一語繰り返される．この場合にもまた，二つの粒子が同種であることは，2粒子の力学変数の置換に対するハミルトニアンの不変性（2）により，またもっと一般に，このような置換に関してはすべての物理的オブザーバブルが不変であるという事実によって表わされる．ここから古典力学の場合と同じように，系の力学的状態の決定についてある種の曖昧さが生じる．しかしこの曖昧さはもっと深刻であり，それがもたらす結果はもっと重大である．

事実，衝突前の系になされた観測によって，粒子の一つが状態$\psi'_0(\boldsymbol{r})$に，もう一つが状態$\psi''_0(\boldsymbol{r})$にあることがわかったとする[1]．実際にはこれらの関数によって，空間の異なる領域に局在する波束が表わされている．したがって関数

$$\begin{aligned}\psi_0(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}) &\equiv \psi'_0(\boldsymbol{r}^{(1)})\psi''_0(\boldsymbol{r}^{(2)})\\ \bar{\psi}_0(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}) &\equiv \psi''_0(\boldsymbol{r}^{(1)})\psi'_0(\boldsymbol{r}^{(2)})\end{aligned} \qquad (3)$$

は線形独立である．ところで，この初期観測によって，系が状態ψ_0にあるのか状態$\bar{\psi}_0$にあるのかを決定することはできない．もっと正確に言うと，この観測はある一組の共立する変数を同時に測定することであり，関数ψ_0と$\bar{\psi}_0$はどちらも，この測定操作によって得られた一組の値に対する固有関数である．これらの関数の線形結合$\lambda\psi_0+\mu\bar{\psi}_0$もすべて同じ性質をもつから，これらの線形結合のうちのどれがこの系の初期力学的状態を表わすかは，この初期観測によって決定されない．この場合には交換縮退があるという．

ここで，この系の時間的変化を調べる．初期条件ψ_0および$\bar{\psi}_0$に対応するシュレーディンガー方程式の解をそれぞれ$\psi(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, t)$および$\bar{\psi}(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, t)$とする．ハミルトニアンが対称性（2）をもつから，$\bar{\psi}$と$\psi$は変数$\boldsymbol{r}^{(1)}$と$\boldsymbol{r}^{(2)}$の置換によって互いに他方から導かれる．この置換に関して対称な関数と反対称な関数

$$\psi^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi+\bar{\psi}), \qquad \psi^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi-\bar{\psi})$$

を導入するとつごうがよい．これらはそれぞれ初期条件

---

[1] これら二つの同種粒子はスピンをもたないと仮定する．こうすれば古典論と量子論の平行性がいっそう印象的になる．

$$\psi_0^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \bar{\psi}_0), \qquad \psi_0^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi - \bar{\psi}_0)$$

に対応するシュレーディンガー方程式の解である．初めに系が力学的状態

$$\Psi_0 = \alpha\psi_0^{(A)} + \beta\psi_0^{(S)} \qquad (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1)$$

にあれば，あとの時刻 t には状態

$$\Psi(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}, t) = \alpha\psi^{(A)} + \beta\psi^{(S)} \tag{4}$$

にある．2粒子のうち一つが $\boldsymbol{r}'$ に，もう一つが $\boldsymbol{r}''$ に見いだされる確率密度 $P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')$ は

$$P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'') = |\Psi(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|^2 + |\Psi(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')|^2 \tag{5}$$

$$= 2\{|\alpha|^2|\psi^{(A)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|^2 + |\beta|^2|\psi^{(S)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|^2\} \tag{6}$$

である(2)．この結果が係数 α, β によらないためには，

$$|\psi^{(A)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')| = |\psi^{(S)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')|$$

になることが必要〔十分〕である．2粒子が相互作用に入ることなく，波束 $\psi'(\boldsymbol{r})$ と $\psi''(\boldsymbol{r})$ が重なり合わない限り，この等式はどんな $\boldsymbol{r}'$ と $\boldsymbol{r}''$ に対しても成り立つ．しかしこれら二つの条件のうち一方でも満たされないときには，一般にこの等式は成り立たない．特殊な場合についてこのことが容易に確かめられる．たとえば，二つの粒子が相互作用をしないで $(V(|\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(2)}|) = 0)$，互いに出会うまで自由に伝播すると仮定しよう．この場合，ψ は二つの自由波束の積 $\psi = \psi'(\boldsymbol{r}^{(1)}, t)\psi''(\boldsymbol{r}^{(2)}, t)$ である．ある時間が経過したとき，波束は重なり合う．言いかえれば，関数 $\psi'(\boldsymbol{r})$ も $\psi''(\boldsymbol{r})$ も 0 でない空間領域ができる．$\boldsymbol{r}$ をこの空間の一点とすれば，

$$|\psi^{(S)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})| = \sqrt{2}|\psi'(\boldsymbol{r})\psi''(\boldsymbol{r})| \neq 0$$

であるが，一方ではどんな $\boldsymbol{r}$ についても

$$|\psi^{(A)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})| = 0 \tag{7}$$

である．中心力ポテンシャルの場合における散乱の問題に関して§9で調べたことはもう一つの興味ある例を提供する．実際，そこで示されたように，$\psi^{(A)}$ の散乱振幅は奇数位の部分球面波の重ね合わせによってつくられ，$\psi^{(S)}$ の振幅は偶数位の部分波の重ね合わせによってつくられる．例外的な場合を除けば，これら二つの振幅が同じ絶対値をとることはありえない．したがって，微分断面積は比 $|\alpha|^2/|\beta|^2$ によって決定的に変わる．

結論として，交換縮退の存在は実質的な困難の原因になっている．なぜなら，一たび衝突が起こると，系に施す測定の結果の統計的な分布に関して，正確な理論的予想をたてることがこれによって妨げられるからである．

この困難はつぎのように対称化の要請を導入することによって除かれる．この要請は線

(2) 2行目の式を出すには，関数 $\psi^{(A)}$ と $\psi^{(S)}$ の対称性

$$\Psi(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') = -\alpha\psi^{(A)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'') + \beta\psi^{(S)}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'')$$

を使えばよい．

形結合（3）の係数 α, β をはっきり決めてしまうものであり，したがって容易に実験的に検証できる．すなわち，

同種2粒子系の力学的状態は，2粒子の置換に対してまったく対称（$\alpha = 0, \beta = 1$）であるか，またはまったく反対称（$\alpha = 1$, $\beta = 0$）でなければならない．

これら二つの可能性のうちどちらが実際に起こるかは，問題になっている粒子の性格による．この要請は任意個数の同種粒子から成る系にも容易に拡張される．この章の第Ｉ節では，これを一般的な形に言い表わし，その主な結果を調べる．第II節は応用に当てられる．

本章を通じて，われわれは置換に関するいくつかの基本的概念を使わなければならない．これらの解説は付録Dの§14にある[3]．

I．対称化の要請

§2. 相似粒子系と対称表現

N粒子系を考える．i 番目の粒子の力学変数は位置 $\boldsymbol{r}^{(i)}$，運動量 $\boldsymbol{p}^{(i)}$，スピン $\boldsymbol{s}^{(i)}$ の関数である．これら三つのベクトルの集合を今後は $\xi^{(i)}$ で表わそう．そのスピンの大きさ，すなわち $\boldsymbol{s}^{(i)2}$ の値がわかれば，i 番目の粒子の状態空間 $\mathscr{F}^{(i)}$ をつくることができる．そして系全体の力学的状態がつくる空間 $\mathcal{E}$ は，テンソル積

$$\mathcal{E} = \mathscr{F}^{(1)} \otimes \mathscr{F}^{(2)} \otimes \cdots \otimes \mathscr{F}^{(N)} \tag{8}$$

である．

これらの粒子のうちの二つが同じスピンをもつとき，二つの粒子は相似であると定義する（相似であっても同種であるとは限らない）．このとき，両者のオブザーバブルのあいだと状態ベクトルのあいだには一対一の対応が定められる．それゆえ，二つの相似粒子はとりかえられる．もっと一般に，n 個の粒子が相似であるとき，これら n 粒子に施しうる $n!$ 個の置換は，はっきり決まった操作であり，各置換に対応して空間 $\mathcal{E}$ の演算子が一つ定まる．われわれはこれらの置換演算子をつくってみよう．差し当たっての議論を単純にするため，$n = N$ と仮定する．

いま，これら N 個の相似粒子のうちの一つを考える．ξ はその基底オブザーバブルの集合であり，$\mathscr{F}$ はその状態ベクトルの空間である．q は $\mathscr{F}$ において交換するオブザーバブルの完全集合であるとする．q の基底系をつくる固有ベクトルを $|q_\kappa\rangle$ で表わし，それ

[3] 付録Dに集められた群論の諸概念は，本章を理解するためにはまったく必要でない．この付録の§14の内容は，残りの部分とは独立な一まとまりのものである．そこで用いられている群論の概念は，群に関する諸定義（群，共役類，不変部分群，など）だけであり，これらについての説明は同じ付録の§2にある．

に対応する固有値列を q_κ で表わす（添字あるいは添字の系 κ によって固有値（列）が互いに区別される）．すなわち

$$\langle q_\kappa | q_\mu \rangle = \delta_{\kappa\mu}. \tag{9}$$

たとえば q として，$\boldsymbol{r}$ の3成分 x, y, z と，z 軸方向のスピン成分 s_z から成る集合が考えられる．系の各粒子 a $(a = 1, 2, \cdots, N)$ に対応して，今述べた定義に適する集合 $q^{(a)}$ が定まる．明らかに，これらのオブザーバブルの全体 $Q \equiv (q^{(1)}, q^{(2)}, \cdots, q^{(N)})$ は，空間 $\mathcal{E}$ において交換するオブザーバブルの完全集合をつくり，空間 $\mathcal{F}^{(1)}, \mathcal{F}^{(2)}, \cdots, \mathcal{F}^{(N)}$ の基底ベクトルのテルソン積によってつくられた

$$|q_\alpha^{(1)} q_\beta^{(2)} \cdots q_\nu^{(N)} \rangle \equiv |q_\alpha\rangle^{(1)} |q_\beta\rangle^{(2)} \cdots |q_\nu\rangle^{(N)} \tag{10}$$

という形のベクトルは，空間 $\mathcal{E}$ におけるベクトルと演算子の表現の一つ，すなわち表現 $\{Q\}$ の基底をつくる．この型の表現を対称表現と名づけよう．

§ 3. 置換演算子

ベクトル (10) によって表わされる力学的状態は，はっきりした物理的意味をもつ．すなわち，粒子1は状態 $|q_\alpha\rangle$ にあり，粒子2は $|q_\beta\rangle$ にあり，…，粒子 N は状態 $|q_\nu\rangle$ にある．これら N 個の粒子に一つの置換を施すということは，状態 $|q_\alpha\rangle, |q_\beta\rangle, \cdots, |q_\nu\rangle$ に対するこれらの粒子の割り当て方を変えることであり，その結果ベクトル (10) を基底 $\{Q\}$ のうちのあるベクトル，一般には (10) と異なるベクトル(4)によって置き換えることになる．このような操作によって，この直交規格化基底に属するベクトルのあいだに一対一の対応がつけられ，したがって状態空間の線形ユニタリ演算子が一つ定められる．N 粒子に施しうる置換 p の一つ一つに，われわれはこのようにして置換演算子 P を結びつける．P はユニタリ性

$$PP^\dagger = P^\dagger P = 1 \tag{11}$$

をもつ．たとえば互換 (1 2)——粒子1と2の交換——によりベクトル (10) が変換されて生じるベクトルは，粒子1が状態 $|q_\beta\rangle$ にあり，粒子2が状態 $|q_\alpha\rangle$ にあり，その他の粒子はすべてもとのままの状態にあることを示す．この置換に結びついた演算子 $P_{(12)}$ は，性質

$$P_{(12)} |q_\alpha^{(1)} q_\beta^{(2)} q_\gamma^{(3)} \cdots q_\nu^{(N)} \rangle = |q_\beta^{(1)} q_\alpha^{(2)} q_\gamma^{(3)} \cdots q_\nu^{(N)} \rangle$$

によって定められる．

式を簡単にするために，$N = 3$ の場合について置換の研究を進めるが，以下に述べる

(4) 個々の状態 $|q_\alpha\rangle, \cdots, |q_\nu\rangle$ が必ずしも全部に異ならないとき，ある置換はベクトル (10) を不変に保つ．これらがすべて同じであるとき，ベクトル (10) は任意の置換に対して不変である．

性質は任意の N に対してもちろん成り立つ．一例として，置換 (1 2 3) に結びついた演算子 $P_{(123)}$ を決めてみる．置換 (1 2 3) によれば，1が3の場所を占め，2が1の場所を，3が2の場所を占める(*)．それゆえ

$$P_{(123)}|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle = |q_\gamma^{(1)}q_\alpha^{(2)}q_\beta^{(3)}\rangle. \tag{12}$$

$|\psi\rangle$ を空間 $\mathcal{E}$ のベクトルとすれば，

$$P_{(123)}|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} P_{(123)}|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle\langle q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}|\psi\rangle$$
$$= \sum_{\alpha\beta\gamma} |q_\gamma^{(1)}q_\alpha^{(2)}q_\beta^{(3)}\rangle\langle q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}|\psi\rangle.$$

最後の行の黙り添字 α, β, γ を取り替えると，

$$P_{(123)}|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} |q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle\langle q_\beta^{(1)}q_\gamma^{(2)}q_\alpha^{(3)}|\psi\rangle \tag{13}$$

となる．いま，表現 $\{Q\}$ における $|\psi\rangle$ の波動関数を $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ とする（値 $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ は，粒子1が状態 $|q_\alpha\rangle$ に，2が状態 $|q_\beta\rangle$ に，3が状態 $|q_\gamma\rangle$ に見いだされる確率の振幅である）．$P_{(123)}|\psi\rangle$ の波動関数は

$$P_{(123)}\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = \psi(q_\beta q_\gamma q_\alpha) \tag{14}$$

となり，これを $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ から導くにはその独立変数に (1 2 3) の逆置換を施せばよい．

置換による変換の法則は，$|u^{(1)}v^{(2)}w^{(3)}\rangle \equiv |u\rangle^{(1)}|v\rangle^{(2)}|w\rangle^{(3)}$ という形のベクトルに対して特に簡明である．それは表現 $\{Q\}$ の基底ベクトルに対する変換法則と同じである．この型のベクトルに P が作用して生じるベクトルは，個別的な状態 $|u\rangle, |v\rangle, |w\rangle$ のあいだで，粒子1，2，3の置換 p を行なって得られるものである．

たとえば（式 (12) を参照），

$$P_{(123)}|u^{(1)}v^{(2)}w^{(3)}\rangle = |w^{(1)}u^{(2)}v^{(3)}\rangle.$$

実際，この場合は式 (13) によって

$$P_{(123)}|u^{(1)}v^{(2)}w^{(3)}\rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma} |q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle\langle q_\alpha|w\rangle\langle q_\beta|u\rangle\langle q_\gamma|v\rangle$$

が得られ，この等式の右辺は $\{Q\}$ の基底ベクトルによる $|w^{(1)}u^{(2)}v^{(3)}\rangle$ の展開である．ここでは特殊な場合について確かめたけれども，この性質は一般に成り立つ(問題1)．したがって，与えられた置換に結びつけられた演算子 P は，これを構成するときに使った特殊な対称表現の選び方によらない．

ベクトルに P が作用するとき，置換 p によってこのベクトルから導かれるベクトルが

(*)［訳注］置換 (1 2 3) は，置換 $\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}$ と同じであって，対応 $1\to2$，$2\to3$，$3\to1$ を表わす．粒子1を粒子2に，粒子2を粒子3に，粒子3を粒子1に置き換えれば，$q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}$ は $q_\alpha^{(2)}q_\beta^{(3)}q_\gamma^{(1)}$ に変わり，これを粒子の番号順に並べると $q_\gamma^{(1)}q_\alpha^{(2)}q_\beta^{(3)}$ となる．

生じるように，空間 $\mathcal{E}$ の演算子 $F(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \cdots, \xi^{(N)})$ にユニタリ変換 P を施すとき，F の独立変数に置換 p を施して得られる演算子が生じる．すなわち，

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_N \end{pmatrix}$$

と置けば，

$$PF(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \cdots, \xi^{(N)})P^\dagger = F(\xi^{(\alpha_1)}, \xi^{(\alpha_2)}, \cdots, \xi^{(\alpha_N)}) \tag{15}$$

が成り立つ．特に，

$$P_{(123)}F(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})P^\dagger_{(123)} = F(\xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \xi^{(1)}) \tag{16}$$

($\xi^{(2)}$ が $\xi^{(1)}$ の場所を占め，$\xi^{(3)}$ が $\xi^{(2)}$ の場所を，$\xi^{(1)}$ が $\xi^{(3)}$ の場所を占める)．

この規則を証明するには，F がこの系の基本オブザーバブルのうちの任意の一つであるとき，この規則が確かに成り立つことを示せば十分である．このようなオブザーバブルの一つを考えると，これを対角型にするような対称表現をつくることがいつでもできる．具体的に述べるため，問題のオブザーバブルは上に考えた表現 $\{Q\}$ の基底オブザーバブルの一つである $q^{(i)}$ としよう．$Pq^{(i)}P^\dagger = q^{(\alpha_i)}$ を示すためには，$\{Q\}$ のすべての基底ベクトルに対してこの両辺が同じ作用をおよぼすことを確かめさえすればよい．この証明に特別な困難はない．ここでは $N=3$，$i=1$，$p=(1\ 2\ 3)$ という特殊な場合に対する証明を示すだけにしておく．すなわち，

$$\begin{aligned} P_{(123)}q^{(1)}P^\dagger_{(123)}|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle &= P_{(123)}q^{(1)}|q_\beta^{(1)}q_\gamma^{(2)}q_\alpha^{(3)}\rangle = q_\beta P_{(123)}|q_\beta^{(1)}q_\gamma^{(2)}q_\alpha^{(3)}\rangle \\ &= q_\beta|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle = q^{(2)}|q_\alpha^{(1)}q_\beta^{(2)}q_\gamma^{(3)}\rangle. \end{aligned}$$

オブザーバブルに適用してみると，このような置換の定め方は，オブザーバブルの置換についてわれわれが抱く物理的なイメージによく適合する．すなわち，オブザーバブル B に置換 p を施して得られるオブザーバブル $PBP^\dagger$ は B と同じスペクトルをもち，$PBP^\dagger$ の固有状態は同じ固有値に対する B の固有状態から，置換演算子 P の適用によって導き出される．

特に，N 粒子の置換に関して B が不変であるのは，これらの粒子の $N!$ 通りの置換のいずれに対しても $PBP^\dagger = B$ となるとき，言いかえれば

$$\text{任意の } P \text{ に対して} \qquad [P, B] = 0$$

のときである．この場合にはしばしば，B は N 粒子に関して対称な演算子であると言われる．

§ 4. 置換演算子の代数．対称化演算子と反対称化演算子

二つの置換 p', p'' をひき続き行なった結果は一つの置換 $p = p''p'$ を行なったのと同じである．置換 p, p', p'' に対応する演算子をそれぞれ P, P', P'' とすれば，置換演算子

の定義そのものから，これらは同じ関係式

$$P = P'' P' \tag{17}$$

にしたがうことがわかる．それゆえ，置換演算子を支配する代数の関係式は，これらの演算子を定めた置換の代数と同じである(5).

特に，任意の演算子 P は互換〔演算子〕の積の形に書き表わされる．この積の形は一通りに決まるものではないけれども，そこに現われる互換の個数は一定の偶奇性 $(-)^p$ をもつ．$(-)^p$ は〔p が偶置換なら $+1$，奇置換なら -1 と定義し，これによって〕置換 p の偶奇性を表わす．P, P', P'' が関係 (17) によって結ばれているならば，明らかに $(-)^p = (-)^{p'+p''}$ である．

いくつかの置換，特に互換はそれ自体の逆に等しい．この場合（(11) を参照），対応する演算子は一つのオブザーバブルであり，それがとりうる固有値は $+1$ と -1 だけである．

一例として互換 $(i\,j)$ を考えると，

$$P^2_{(ij)} = 1. \tag{18}$$

固有値 $+1$ に対する固有ベクトルは互換 $(i\,j)$ によって不変である．それらは i と j に関して対称であると定義する．i と j に関して対称なベクトル全体がつくる空間への射影子は，対称化演算子

$$S_{[ij]} = \frac{1}{2}(1+P_{(ij)}) \tag{19}$$

である．固有値 -1 に対する固有ベクトルは互換 $(i\,j)$ によって符号を変える．それらは i と j に関して反対称であると定義する．i と j に関して反対称なベクトル全体がつくる空間への射影子は，反対称化演算子

$$A_{[ij]} = \frac{1}{2}(1-P_{(ij)}) \tag{20}$$

である．明らかに

$$\begin{gathered} S_{[ij]}+A_{[ij]} = 1, \qquad S_{[ij]}-A_{[ij]} = P_{(ij)} \\ P_{(ij)}S_{[ij]} = S_{[ij]}P_{(ij)} = S_{[ij]}, \qquad P_{(ij)}A_{[ij]} = A_{[ij]}P_{(ij)} = -A_{[ij]} \end{gathered} \tag{21}$$

が成り立つ．どんなベクトルも i と j に関して反対称なベクトルと，i と j に関して対称

(5) 特に $P_{(123)} = P_{(12)}P_{(23)}$ が成り立つ．波動関数 $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ に $P_{(23)}$ と $P_{(12)}$ を順に作用させると実際に (14) がもう一度得られることを確かめてみよう．$\psi_1(q_\alpha q_\beta q_\gamma) \equiv P_{(23)}\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ と置けば，$\psi_1(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = \psi(q_\alpha q_\gamma q_\beta)$ である．したがって
$$P_{(123)}\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = P_{(12)}\psi_1(q_\alpha q_\beta q_\gamma) = \psi_1(q_\beta q_\alpha q_\gamma) = \psi(q_\beta q_\gamma q_\alpha).$$
この結果はまた，関数 $\psi(q_\alpha q_\beta q_\gamma)$ の独立変数に対してはじめに置換 (12) を行ない，ついで置換 (23) を行なっても得られる．

なベクトルとの和である．この型の分解は同種2粒子の衝突に関連して，§1の議論に用いられた．

今度は $N!$ 個の置換 P を考え，互換 $P_{(ij)}$ に関連してさきに定義した力学的状態の対称性および反対称性の概念を拡張する．

そのために，空間 $\mathcal{E}$ のベクトル $|u\rangle$ を考え，$|u\rangle$ およびこれから置換によって導き出されるベクトルの全体で張られる空間を $\mathcal{E}_u$ で表わす．この次元数は，$N!$ 個のベクトル $P|u\rangle$ が線形独立であるか否かによって $N!$ に等しいかまたはこれより小さい．

極端な場合は，$P|u\rangle$ がすべて同じ状態を表わす場合，すなわち

$$\text{任意の } p \text{ に対して} \qquad P|u\rangle = c_p|u\rangle \tag{22}$$

となる場合である．定数 c_p の値はきわめて強い条件によって制約される．P が互換であるとき，c_p のとりうる値が $+1$ と -1 だけであることはわかっている．さらに，任意の互換 $(i\,j)$ は積 $(1\,i)\,(2\,j)\,(1\,2)\,(2\,j)\,(1\,i)$ に等しいから，

$$P_{(ij)} = P_{(1i)}P_{(2j)}P_{(12)}P_{(2j)}P_{(1i)}$$

であり，したがって

$$c_{(ij)} = c^2_{(1i)}c^2_{(2j)}c_{(12)} = c_{(12)}. \tag{23}$$

それゆえ，定数 c はすべての互換に対して同じであり，〔この値を $c_{\text{tr.}}$ とすれば〕$c_{\text{tr.}} = +1$ であるかまたは $c_{\text{tr.}} = -1$ である．すべての置換 p は互換の積であるから，これに対応する定数 c_p は $c_{\text{tr.}}$ の累乗である．そして p が偶置換であるか奇置換であるかによって，偶数乗または奇数乗である．

要約すれば，性質 (22) が満たされるのはつぎの二つの場合に限る：

a) 任意の p に対して $\quad c_p = 1, \qquad P|u\rangle = |u\rangle \qquad (24)$

b) 任意の p に対して $\quad c_p = (-)^p, \qquad P|u\rangle = (-)^p|u\rangle. \qquad (25)$

a) が成り立つかまたは b) が成り立つかによって，$|u\rangle$ は N 粒子の置換に関し<u>対称</u>あるいは<u>反対称</u>であるといわれる．

対称なベクトルの全体は $\mathcal{E}$ の部分空間をつくり，反対称なベクトルの全体はそれに直交する部分空間をつくる．これらの部分空間をそれぞれ $\mathcal{E}^{(S)}, \mathcal{E}^{(A)}$ で表わす．これらの上への射影子はそれぞれ

$$S = \frac{1}{N!}\sum_P P, \qquad A = \frac{1}{N!}\sum_P (-)^p P \tag{26}$$

($\sum_P$ は $N!$ 個の置換全部についての和を表わす)．実際，$N!$ 個の置換演算子を並べて得られる列を考えてみる．この際，配列の順序は任意に定めておく．この列の各要素に右から(または左から)特殊な置換演算子 P_1 を掛けても，この列の要素の順序が変わるだけである．このことから

$$P_1 S = SP_1 = S, \qquad P_1 A = AP_1 = (-)^{p_1} A. \tag{27}$$

また，各要素 P をその逆演算子 $P^\dagger$ に変えても，この列の要素の順序が変わるだけである．互いに逆な二つの置換は同じ偶奇性をもつから，

$$S = S^\dagger, \qquad A = A^\dagger \tag{28}$$

が成り立つ．演算子 S および A の定義 (26) と等式 (27) から，簡単な計算によって，

$$S^2 = S, \qquad A^2 = A, \tag{29}$$

および

$$SA = AS = 0 \tag{30}$$

が導き出される．関係式 (28), (29), (30) により，S と A は互いに直交する射影子である．ところで，$|u\rangle$ が $\mathcal{E}^{(S)}$ に属するならば（性質 (24) により），

$$S|u\rangle = \frac{1}{N!}\sum_P P|u\rangle = \left(\frac{1}{N!}\sum_P\right)|u\rangle = |u\rangle$$

である．逆に，任意のベクトルを $|\ \rangle$ とするとき，(27) により，

$$PS|\ \rangle = S|\ \rangle$$

が成り立つ．したがって S による射影の空間は確かに $\mathcal{E}^{(S)}$ である．A が $\mathcal{E}^{(A)}$ へ射影することも同様にして示される．

$N=3$ のとき，S と A を具体的な形に書けば，

$$S = \frac{1}{6}\left(1+P_{(12)}+P_{(23)}+P_{(31)}+P_{(123)}+P_{(321)}\right)$$

$$A = \frac{1}{6}\left(1-P_{(12)}-P_{(23)}-P_{(31)}+P_{(123)}+P_{(321)}\right).$$

この例からわかるように，$N>2$ である限り $S+A \neq 1$ である．実際，N 粒子の偶置換全体に対して不変な状態のつくる空間を考えれば，$S+A$ はこの空間への射影子になっている．$N>2$ である限り，この空間は $\mathcal{E}$ の〔本来の〕部分空間である．

この研究の始めに定義した空間 $\mathcal{E}_u$ にもどろう．(27) から，任意のPに対して

$$SP|u\rangle = S|u\rangle, \qquad AP|u\rangle = (-)^p A|u\rangle$$

であることがわかる．それゆえ $\mathcal{E}_u$ を張るベクトル $P|u\rangle$ はすべて $\mathcal{E}^{(S)}$ 上に同じ射影を落とし，符号を別にすれば $\mathcal{E}^{(A)}$ 上にも同じ射影を落とす．したがって，$S|u\rangle$ が0と異なるかまたは0であるかによって，空間 $\mathcal{E}_u$ は対称なベクトルをただ一つだけ含むかまたはまったく含まない．同様に，$A|u\rangle \neq 0$ ならば $\mathcal{E}_u$ は反対称なベクトルをただ一つだけ含み，$A|u\rangle = 0$ ならばまったく含まない[6]．

[6] $N!$ 個のベクトル $P|u\rangle$ が線形独立であるときは，これらのベクトルの特殊な線形結合として，$S|u\rangle$ も $A|u\rangle$ も確かに0でない．この場合，$\mathcal{E}_u$ は一つの対称ベクトルと一つの反対称ベクトルを含む．

§5. 同種粒子と対称化の要請

いままで取り扱ってきた系の N 個の粒子が相似であるばかりでなく，同種である場合は，これらの粒子にどんな置換を施しても，系の力学的性質は何の変更も受けない．この不変条件によって系の変化の法則と系のオブザーバブルがどのような制約を受けるかを調べる．

初期時刻 t_0 における系の状態が $|\psi_0\rangle$ であるとき，あとの時刻 t における状態 $|\psi_t\rangle$ をこれから導くには，時間に対する変化の演算子 $U(t,t_0)$ を適用すればよい．すなわち $|\psi_t\rangle = U(t,t_0)|\psi_0\rangle$．初期状態が $P|\psi_0\rangle$ であるときも，この系の変化は置換 P を除けば厳密に同じであり，時刻 t における状態は $P|\psi_t\rangle$ である．したがって

$$U(t,t_0)P|\psi_0\rangle = P|\psi_t\rangle = PU(t,t_0)|\psi_0\rangle$$

となるが，これは任意の ψ_0 について成り立つはずであるから，

$$[P, U(t,t_0)] = 0. \tag{31}$$

この系のハミルトニアンを H とすれば，$U(t,t_0)$ はシュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t,t_0) = HU(t,t_0)$$

の解であり，初期条件 $U(t_0,t_0)=1$ によって定められる．(31) と，その両辺を t で微分して得られる式から，

$$[P, H] = 0 \tag{32}$$

が導かれる．逆に，H と P が交換するならば，$U(t,t_0)$ と P によるその変換 $PUP^\dagger$ とは等しい．どちらの演算子も同じシュレーディンガー方程式にしたがい，同じ初期条件を満たすからである．その結果 U と P は交換する．要約すれば，系の変化の法則が置換によって不変であるためには，ハミルトニアン H が任意の P に対して関係 (32) を満たすことが必要十分である．

他方この系の物理的オブザーバブル[7] B を考え，その固有値 b に対する固有状態の一つを $|u\rangle$ とする．系が状態 $|u\rangle$ にあれば，B の測定は必ず b という結果を与える．したがって，$|u\rangle$ に置換 P を適用して得られる状態 $P|u\rangle$ に系があっても，B の測定は同じ結果を与えるはずである．すなわち

$$BP|u\rangle = bP|u\rangle$$

であり，これは任意の置換 P に対して成り立つ．言いかえると，N 粒子の置換を残らず $|u\rangle$ に適用して生じる空間 $\mathcal{E}_u$ を考えれば，$\mathcal{E}_u$ のベクトルはすべて同じ固有値 b に対す

(7) 物理的オブザーバブルという言葉の表わす意味は，第13章，§15 で定義されている．そこで考察されたのは，《2π の回転》による物理的オブザーバブルの不変性の分析であり，ここでなされるのは置換による不変性の分析である．両者を比較するがよい．

る固有ベクトルでなければならない（交換縮退）. B のすべての固有値に対してこの性質が成り立つためには，任意の P に対して

$$[B, P] = 0 \tag{33}$$

となることが必要十分である（第7章，§15を参照）.

要約すれば，系のハミルトニアン H およびすべての物理的オブザーバブルが N 粒子に関して対称であるとき，これらの粒子は同種である.

したがって，個別的にとった各粒子の変数 q を同時に測定することによって系の力学的状態を決めようとしても，これは最も良い場合でさえ交換縮退を除いて決定されるにすぎない[8]. n_1 個の粒子が状態 $|q_1\rangle$ にあり，n_2 個が状態 $|q_2\rangle$ にあり，…，n_κ 個が状態 $|q_\kappa\rangle$ にあり，…（$n_1+n_2+\cdots+n_\kappa+\cdots=N$）ということは断言できるけれども，これらの状態の一つ一つを占める粒子の同定は決められないで残る．表現 $\{Q\}$ の基底ベクトルのうちには，求める性質をもつものが（$N!/n_1!\,n_2!\cdots n_\kappa!\cdots$）個存在する．これらのベクトルが張る空間を $\mathcal{E}(n_1 n_2 \cdots n_\kappa \cdots)$ とする（このようなベクトルの一つに $N!$ 個の置換を施すとこの空間ができる）．系の力学的状態はこの空間のベクトルの一つによって確かに表わされるけれども，ここで考えている観測によって，それがどのベクトルであるかを決めることはできない．ところが§1の例で知ったように，どのベクトルを選んだかによって理論的予想が時には左右される．それゆえ，この曖昧さは現実的困難をひき起こすものである．これを除くために，つぎの**対称化の要請**が導入される：

系が N 個の同種粒子を含むとき，その力学的状態はこれら N 粒子の置換に関して，必ず全部対称であるかまたは全部反対称である.

どちらの対称化規則を適用するかは，同種粒子の性格によって決まる．状態が対称である粒子を**ボース粒子**と呼び，反対称である粒子を**フェルミ粒子**という（この命名法の由来はあとで明らかになる）．実験の示すところでは，自然のなかに見いだされるスピン1/2の素粒子（電子，陽子，中性子，など）はフェルミ粒子である．これに対して，スピン整数の素粒子（光子，π 中間子，など）はボース粒子である.

さきに定義した空間 $\mathcal{E}(n_1 n_2 \cdots n_\kappa \cdots)$ は対称なベクトルを一つと反対称なベクトルを一つしかもたない．それゆえ，対称化の要請によって交換縮退は完全に取り除かれる．こ

---

[8] $q^{(1)}, q^{(2)}, \cdots, q^{(N)}$ の全体は，空間 $\mathcal{E}$ において交換するオブザーバブルの完全集合をつくるが，これらのオブザーバブルの対称関数だけが物理的オブザーバブルであって，物理的オブザーバブルだけでは $\mathcal{E}$ における完全集合をつくらない．実際には，のちに導入する対称化の要請によって，状態空間として $\mathcal{E}$ のある部分空間が採用され，そこでは問題の物理的オブザーバブルが完全集合をつくり，その結果，交換縮退が完全に取り除かれる.

こで確かめる必要があるのは，この要請が量子力学における系の変化および量の測定に関する基本的な要請とのあいだに矛盾をひき起こさないということである．

ボース粒子の場合を考える（フェルミ粒子の場合も同様に取り扱われる）．対称な状態への射影子 S は前の§4で定義されている．これは置換演算子の特殊な線形結合（式(26)）であるから，系の変化の演算子 $U(t, t_0)$ および物理的オブザーバブル B と交換する．すなわち

$$[S, U(t, t_0)] = 0 \tag{34}$$

$$[S, B] = 0. \tag{35}$$

それゆえ，与えられた初期時刻に系の力学的状態が対称であるならば，(34) によって，系が外部からの干渉を受けずに変化する限り，対称の性質はいつまでも保存されることが確かめられる．いま，B の理想測定が行なわれたとしよう．(35) によれば，S と B とは（少なくとも）一つの基底系を共有する．力学的状態が対称ならば，この基底系による状態ベクトルの展開式は B の対称な固有ベクトルしか含まない．したがって B の測定操作により，系は確かに対称な状態のままである．

§6.　ボース粒子とボース=アインシュタイン統計

Nボース粒子系を考える．この状態ベクトルの空間は $\mathcal{E}$ の部分空間 $\mathcal{E}^{(S)}$ である．$\{Q\}$ の基底系から出発して，$\mathcal{E}^{(S)}$ のなかの基底系をつぎのような手続きを踏んでつくることができる．

各部分空間 $\mathcal{E}(n_1 n_2 \cdots n_\kappa \cdots)$ のなかには，1に規格化された対称なベクトルが（位相を除いて）ただ一つある．それはベクトル

$$\left[\frac{N!}{n_1!\, n_2! \cdots n_\kappa! \cdots}\right]^{1/2} S|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle \tag{36}$$

である．ただし，$|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle$ は $\{Q\}$ の基底ベクトルで，最初の n_1 個の粒子が状態 $|q_1\rangle$ を，つぎの n_2 個が状態 $|q_2\rangle$ を，…，つぎの n_κ 個が状態 $|q_\kappa\rangle$ を，… 占めていることを示す．S はさきに定義した対称化演算子である（式 (26)）．括弧のなかの定数は規格化の定数である（規約 $0! = 1$ を用いて書かれている）．実際，同じ個別的状態にある二つの粒子の交換によって $|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle$ は不変であり，異なる状態を占める二つの粒子の交換によって別の $\{Q\}$ 基底ベクトルに変換される．もっと一般に，個別的状態 $|q_1\rangle, |q_2\rangle, \cdots, |q_\kappa\rangle, \cdots$ に対する N 粒子の割り当てを変えない $\prod n_\kappa! = n_1!\, n_2! \cdots n_\kappa! \cdots$ 個の置換によって $|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle$ は不変であり，その他の置換によってはいつでも別の $\{Q\}$ 基底ベクトルに移される．$N!$ 個の各置換を $|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle$ に施せば，$\mathcal{E}(n_1 n_2 \cdots n_\kappa \cdots)$ の基底である $[N!/\prod n_\kappa!]$ 個のベクトルが得られ，その一つ一つは $(\prod n_\kappa!)$ 回繰り返して現われる．ベクトル (36) はこれらの基底ベクトルの和に

$[\prod n_\kappa!/N!]^{1/2}$ を掛けたものに等しく，確かに1に規格化された対称ベクトルである．

結論として，条件

$$n_1+n_2+\cdots+n_\kappa+\cdots=N$$

を満たす0または正の整数の列 $n_1, n_2, \cdots, n_\kappa, \cdots$ の一つ一つに対応して，ベクトル (36) によって表わされる対称状態がただ一つだけ定められる．こうしてつくられたベクトルの全体は $\mathcal{E}^{(S)}$ の直交規格化基底をつくる．

ボース粒子の気体はボース=アインシュタイン統計にしたがうことを示そう．ボース粒子の気体とは，きわめて大きな数 N 個のボース粒子から成る系であって，粒子間の相互作用はごく弱いため第1近似では無視することができ，系のハミルトニアン H は N 個の1粒子ハミルトニアンの和

$$H=h^{(1)}+h^{(2)}+\cdots+h^{(i)}+\cdots+h^{(N)} \tag{37}$$

の形に書かれるものであると了解しておく．ボルツマンの理論によれば，最も起こり易い《巨視的状態》に系があるとき，熱平衡が実現する．与えられた一つの《巨視的状態》とは，実のところ量子的状態（すなわち《微視的状態》）の集まりを示すものであり，それらは互いにきわめて近いため巨視的スケールでは区別できないということを思い出そう．エルゴード仮説により，同じエネルギーをもつ微視的状態はすべて同程度に起こり易い．それゆえ，与えられた巨視的状態をとる確率は，それを構成する微視的状態のうちの異なるものの個数に比例する．系の熱力学的平衡は，この個数を数え上げることによって本質的に決められる．表現 $\{Q\}$ を定める個別的力学変数の集合 q のなかに h が含まれているとする．起こりうるいろいろな1粒子状態

$$|q_1\rangle, |q_2\rangle, \cdots, |q_\kappa\rangle, \cdots$$

に N 個の粒子をそれぞれ

$$n_1, n_2, \cdots, n_\kappa, \cdots \quad (\text{個})$$

ずつ割り当てると，この分布によって（ベクトル (36) で表わされる）ボース粒子系の微視的状態がただ一つだけ定まる．これがちょうどボース=アインシュタイン統計である．この統計では，粒子が互いに区別できないものと考えられ，したがって系の状態についても，いろいろな1粒子状態を占める粒子の同定のしかただけが異なるものは，一つの微視的状態としてしか数えない．これに反してマクスウェル=ボルツマンの統計では，各粒子が微視的なスケールでは区別できると考えられ，同じ一つの分布 $n_1, n_2, \cdots, n_\kappa, \cdots$ に対して，$[N!/\prod n_\kappa!]$ 個の系の状態が異なる微視的状態として数えられる．

重要な注意；熱平衡にある系の力学的状態を表わす密度演算子の一般的な式

$$\rho = \frac{e^{-H/kT}}{\mathrm{Tr}\, e^{-H/kT}} \tag{38}$$

は，第8章，§25においてそれから導き出されたいくつかの式とともに，ここでもそのまま正しい．対称化の要請によって生じる重大な違いは，ρ が空間 $\mathcal{E}^{(S)}$ の演算子であって，空間 $\mathcal{E}$ の演算子ではないこと，また量子統計のいろいろな処理，特に跡の計算をこの制限された空間で行なう必要があるということに由来する．たとえば H が (37) の形をしているとき，ρ を空間 $\mathcal{E}$ の演算子と考えれば，ρ は個別的空間 $\mathcal{F}^{(1)}, \mathcal{F}^{(2)}, \cdots, \mathcal{F}^{(N)}$ の一つ一つで定義された演算子のテンソル積であり，事実

$$\rho = \prod_{i=1}^{N} [e^{-h^{(i)}/kT}/\mathrm{Tr}_i\, e^{-h^{(i)}/kT}]$$

が成り立つ．しかし ρ が $\mathcal{E}^{(S)}$ の演算子であるとき，この因数分解はまったく意味を失う．ばらばらにとった N 個の因数は $\mathcal{E}^{(S)}$ の演算子ではないからである．

§7. フェルミ粒子とフェルミ=ディラック統計．排他原理

上に述べた分析は，N 個のフェルミ粒子から成る系についても繰り返される．この系の状態空間は $\mathcal{E}$ の部分空間 $\mathcal{E}^{(A)}$ である．

表現 $\{Q\}$ から出発すれば，各部分空間 $\mathcal{E}(n_1 n_2 \cdots n_\kappa \cdots)$ のなかから1に規格化された反対称ベクトルを一つ——それが存在するならば——とることにより，反対称ベクトルの完全直交規格化系が得られる．このようなベクトルが存在するためには，$A|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle$ が0と異なることが必要十分である．整数列 $n_1, n_2, \cdots, n_\kappa, \cdots$ のなかに少なくとも一つ1より大きいものがあると仮定すると，$|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle$ で表わされる状態において，少なくとも二つの粒子，たとえば i 番目と j 番目の粒子が同じ1粒子状態を占め，このベクトルはこれら2粒子の交換に関して対称である．すなわち

$$|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle = \frac{1}{2}(1+P_{(ij)})\,|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle.$$

ところが，性質 (27) から，

$$A(1+P_{(ij)}) = 0.$$

したがって，この場合には

$$A\,|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots\cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle = 0. \tag{39}$$

言いかえれば，二つのフェルミ粒子が同じ1粒子量子状態を占めることはできない．これが**パウリの排他原理**である[9]．

いま，各1粒子状態はたかだか一つの粒子によってしか占められない（$n_\kappa = 0$ または

(9) 排他原理は電子の一般的性質として，パウリによって1925年に定式化された．これによって複雑な原子の構造が説明されるようになった（§12を参照）．

1) とする．ベクトル

$$A|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle \equiv \frac{1}{N!}\sum_P (-)^p P|q_1^{n_1} q_2^{n_2} \cdots q_\kappa^{n_\kappa} \cdots\rangle$$

は互いに直交する $N!$ 個のベクトルの和であるから，確かに0でなく，$(1/N!)$ のノルムをもつ．N 粒子が占める1粒子状態を $|q_\alpha\rangle, |q_\beta\rangle, \cdots, |q_\nu\rangle$ とすれば，これに対応する反対称状態はノルム1のベクトル $\sqrt{N!}\,A|q_\alpha^{(1)} q_\beta^{(2)} \cdots q_\nu^{(N)}\rangle$ によって表わされる．これはN次行列式（**スレイター行列式**）

$$\sqrt{N!}\,A|q_\alpha^{(1)} q_\beta^{(2)} \cdots q_\nu^{(N)}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} |q_\alpha\rangle^{(1)} & |q_\alpha\rangle^{(2)} & \cdots & |q_\alpha\rangle^{(N)} \\ |q_\beta\rangle^{(1)} & |q_\beta\rangle^{(2)} & \cdots & |q_\beta\rangle^{(N)} \\ \vdots & & & \\ |q_\nu\rangle^{(1)} & |q_\nu\rangle^{(2)} & \cdots & |q_\nu\rangle^{(N)} \end{vmatrix} \tag{40}$$

の形に書き表わされる．行列式の定義そのものを思い出せば，この等式は容易に証明される．また，N 個の1粒子状態のうちのいくつかが同じであるときにも，この等式は正しい．この場合には，行列式の少なくとも2行が同じになり，パウリの排他原理が得られるからである．

要約すれば，1粒子状態 $|q_1\rangle, |q_2\rangle, \cdots, |q_\kappa\rangle, \cdots$ のなかから異なる N 個の状態の集合 $|q_\alpha\rangle, |q_\beta\rangle, \cdots, |q_\nu\rangle$ を選ぶごとに，それに対応してただ一つの反対称状態が定まり，ベクトル (40) によって表わされる．こうしてつくられたベクトルの全体は $\mathcal{E}^{(A)}$ の直交規格化基底をつくる．

フェルミ粒子の気体はフェルミ=ディラック統計にしたがう．証明法はボース粒子の場合と同様である．異なる点は微視的状態を数える法則だけである．異なる N 個の1粒子状態の集合がそれぞれただ一つのフェルミ粒子系の微視的状態を定める（これはベクトル (40) で表わされる)．これがちょうどフェルミ=ディラック統計の仮説である．この仮説によれば，N個の粒子は区別できないものであり，同じ1粒子状態を2個以上で占めることはけっしてできない．

さきの§6の終りに述べた注意はフェルミ粒子にもそのままあてはまる．熱平衡にあるフェルミ粒子系の密度演算子は (38) によって与えられるが，もちろんこれを空間 $\mathcal{E}^{(A)}$ の演算子とみなすのである．

統　計	マクスウェル=ボルツマン	ボース=アインシュタイン	フェルミ=ディラック
粒子の特性	区別される	区別されない	区別されない＋排他
状態空間	$\mathcal{E}$	$\mathcal{E}^{(S)}$	$\mathcal{E}^{(A)}$

同種粒子系に関する三つの型の統計の相違は，結局のところ，力学的状態空間に対してどんな仮説をとるかによって生じる．それは上の表のようにまとめられる．

§ 8. 波動関数の対称化はつねに必要であるか

n 個の同種粒子，たとえば n 個の電子から成る系を考えよう．さきに述べたように，この系の力学的状態は反対称な波動関数によって表わされる．しかしながら，これらの電子だけが宇宙に存在する電子ではない．他の電子を無視し，これら n 個の電子から成る系を残りのものとは別のまとまりとして取り扱うことは，n 個の電子の力学的性質が他の電子の存在によって影響を受けないと仮定している．この仮定が確かな根拠をもつかどうか，あるいは逆に，対称化の要請がこれら n 個の電子と他の電子とのあいだに何らかの相互関係をつくることにより，この仮定を無効にするかどうかを問題にすることができる．

実際には，この系の電子はすべて空間のある領域 D の内部にあり，またこの系の力学的性質のうちわれわれが関心をもつものは，すべてこの領域の内部で行なわれる何らかの測定操作に対応する．系の電子に対する他の電子の相互作用が無視され，他の電子が D の内部に侵入しない限り，他の電子の存在をまったく無視することが許される．この結果はきわめて一般的であって，ボース粒子にもフェルミ粒子にも適用される．これを2フェルミ粒子系の場合に証明しよう．

他のすべての粒子の存在を無視すれば，これら二つのフェルミ粒子の力学的状態は，1に規格化された一つの反対称な波動関数 $\varphi(1,2)$ によって表わされる．ここで1と2はそれぞれ粒子1と2の座標およびスピン成分 s_z を表わす．一般に，この系の任意の状態 χ は1に規格化された一つの反対称な波動関数 $\chi(1,2)$ によって表わされる．与えられた時刻に系が状態 φ にあるならば，この時刻における力学的性質は確率

$$w = |\langle\chi|\varphi\rangle|^2 \tag{41}$$

によって与えられる(*).

現実には，これら二つのフェルミ粒子は一つの N フェルミ粒子系の一部になっている．2粒子系の力学的性質が，他の $(N-2)$ 個のフェルミ粒子の存在を正確に考慮に入れてもやはり同じであるかどうかを調べてみる．$\Psi(3,4,\cdots,N)$ は他の $(N-2)$ 個のフェルミ粒子の力学的状態を表わすノルム1の反対称な波動関数であるとする．もしもフェルミ粒子1および2がフェルミ粒子 $3,4,\cdots,N$ と同種でないとすれば，全体の系の状態は $\varphi(1,2)\Psi(3,4,\cdots,N)$ で表わされ，このように因数分解されるという性質は，初めの二つ

(*) ［訳注］ ここはすこしわかりにくいかもしれないが，$|\chi\rangle$ として，注目する力学変数の固有関数（列）をとり，いろいろな固有値をとる確率を (41) で調べて系の力学的性質を知る，と考えればよい．

のフェルミ粒子と残りの粒子とのあいだの相互作用が無視できる限り，そのまま保たれるであろう．実際には，全体の系の状態を正しく表わすベクトル $|\Phi\rangle$ は反対称ベクトル $A|\varphi\Psi\rangle$ に比例する．A は N 粒子の反対称化演算子（定義 (26)）である．

仮定により，波束 φ と Ψ は互いに重ならない．もっと正確に言えば，われわれが注目する二つのフェルミ粒子は確かに一定の空間領域 D 内にあり，他の粒子はすべて確かにこの領域外にある．また，われわれが取り扱う力学的性質は，D 内にある二つのフェルミ粒子の性質だけである．

$\Theta(3,4,\cdots,N)$ によって一般的に表わされるノルム1の反対称波動関数は，$(N-2)$ 個の位置ベクトル $\boldsymbol{r}^{(3)},\cdots,\boldsymbol{r}^{(N)}$ のうち一つでも D にあるとき0になるものとする．すなわち全部 D の外にある $(N-2)$ 個のフェルミ粒子の系の状態が Θ で表わされる．仮定により Ψ はこの型の関数である．$\Theta_1,\Theta_2,\cdots,\Theta_i,\cdots$ がこの型の関数のなかで完全直交規格化系をつくるとき，Ψ は

$$\Psi=\sum_i \Theta_i\langle\Theta_i|\Psi\rangle$$

と表わされる．$\chi(1,2)$ によって一般的に表わされる波動関数は1と2に関して反対称であり，ノルムは1で，〔Θ とは〕逆の性質をもつものとする．すなわち，ベクトル $\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)}$ のうちの一つでも D の外にあれば χ は0になるとする．これは同時に D 内にある二つのフェルミ粒子を表わす．関数 φ は仮定によりこの型の関数である．

N 個の粒子の置換はベクトル $|\chi\Theta\rangle$ に対する作用によって二つの種類に分けられる．第1種の置換は，符号は別にして，ベクトル $|\chi\Theta\rangle$ を不変にするものであり，これを F で表わす．これは1と2をそれらのあいだで取りかえ，$3,4,\cdots,N$ をそれらのあいだで取りかえる $2!(N-2!)$ 個の置換である．すなわち

$$F|\chi\Theta\rangle=(-)^f|\chi\Theta\rangle.$$

これ以外の置換はいずれも粒子 1, 2 のうちの少なくとも一つを他の $(N-2)$ 個の一つに取りかえるもので，これを G で表わす．その結果，$G|\chi\Theta\rangle$ が表わす状態においては，1または2が確かに D の外にあり，このベクトルは $|\chi\Theta\rangle$ 型のベクトル全部と直交する．すなわち

$$\langle\chi'\Theta'|G|\chi\Theta\rangle=0.$$

これら二つの性質から，等式

$$\begin{aligned}\langle\chi'\Theta'|A|\chi\Theta\rangle&=\frac{1}{N!}\sum_P(-)^p\langle\chi'\Theta'|P|\chi\Theta\rangle\\&=\frac{1}{N!}\sum_F(-)^f\langle\chi'\Theta'|F|\chi\Theta\rangle=\frac{2!\,(N-2)!}{N!}\langle\chi'\Theta'|\chi\Theta\rangle\qquad(42)\end{aligned}$$

が導き出される．ついでに，$A|\chi\Theta\rangle$ のノルムは $\langle\chi\Theta|A|\chi\Theta\rangle$ すなわち $2!(N-2)!/N!$ であることを注意しておく．

ここで，領域 D 内の二つのフェルミ粒子が状態 χ にある確率 w を求めてみよう．もしも残りの $(N-2)$ 個のフェルミ粒子が初めの二つと異なるならば，系の状態は $|\varphi\Psi\rangle$ によって表わされ，問題の確率は

$$\sum_i |\langle\chi\Theta_i|\varphi\Psi\rangle|^2 = |\langle\chi|\varphi\rangle|^2 (\sum_i |\langle\Theta_i|\Psi\rangle|^2) = |\langle\chi|\varphi\rangle|^2 \tag{43}$$

となるであろう．しかし N 個のフェルミ粒子が同種であるから，その力学的状態は

$$|\Phi\rangle = \sqrt{{}_N\mathrm{C}_2}\, A|\varphi\Psi\rangle \qquad \left({}_N\mathrm{C}_2 = \frac{N!}{2!\,(N-2)\,!}\right)$$

であり，求める確率は，直交規格化反対称ベクトル

$$|X_i\rangle = \sqrt{{}_N\mathrm{C}_2}\, A|\chi\Theta_i\rangle$$

によって張られる状態のどれか一つに系を見いだす確率である．すなわち

$$w = \sum_i |\langle X_i|\Phi\rangle|^2 = ({}_N\mathrm{C}_2)^2 \sum_i |\langle\chi\Theta_i|A|\varphi\Psi\rangle|^2.$$

等式 (42) を適用し，(43) を考慮に入れると，(41) と同じ結果が得られる．すなわち

$$w = \sum_i |\langle\chi\Theta_i|\varphi\Psi\rangle|^2 = |\langle\chi|\varphi\rangle|^2.$$

このようなわけで，残りの $(N-2)$ 個のフェルミ粒子の存在をまったく無視してしまっても，正しい結果が確かに得られる．

II. 応　用

§ 9.　スピンのない同種 2 粒子の衝突

§1 で取り扱った衝突の問題に戻る．

$(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P})$ と $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ はそれぞれ重心と相対粒子の力学変数であるとする．すなわち

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}^{(1)}+\boldsymbol{r}^{(2)}), \qquad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}^{(1)}-\boldsymbol{r}^{(2)}. \tag{44}$$

ハミルトニアンは

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{4m}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{m}+V(\boldsymbol{r}) \tag{45}$$

と書かれ，系の力学的状態は各瞬間ごとに $\boldsymbol{R}$ と $\boldsymbol{r}$ を含む一つの波動関数 $\Psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r})$ によって表わされる．

二つの粒子の交換によって，$\boldsymbol{R}$ は不変であり，$\boldsymbol{r}$ は $-\boldsymbol{r}$ に変わる．この系の波動関数に課せられる対称化の条件は

$$\Psi(\boldsymbol{R}, -\boldsymbol{r}) = \pm\Psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}) \tag{46}$$

となる[10]．上の符号は二つの粒子がボース粒子である場合に対応し，下の符号はフェル

(10) この置換は空間の反転とは別の操作である．空間の反転によれば，$\boldsymbol{R}$ と $\boldsymbol{r}$ が両方とも符号を変える．今の場合，粒子はスピンをもたず，またあとでわかるように，↗

ミ粒子である場合に対応する．

まず，二つの粒子が異なるという仮定の下に同じ衝突問題を取り扱う．この場合の解法は第10章の第I節に与えられている．本章の§4－§7の記号を使って，この解法を簡単に復習しておこう．標的粒子と入射ビームの1粒子から成る系を考えると，衝突前（$t \ll 0$）における系の状態は相対速度 $\boldsymbol{v} = \hbar \boldsymbol{k}/(m/2)$ と衝突パラメータ $\boldsymbol{b}$ によって特徴づけられる．それは $\Phi(\boldsymbol{R}, t)\varphi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r}, t)$ という形の積で表わされ，Φ と φ はそれぞれノルム1の自由波束である[11]．もしわれわれが重心系に位置を占めれば，波 $\Phi(\boldsymbol{R}, t)$ の群速度は0である．波 $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$ は速度 $\boldsymbol{v}$ で伝わり，断面積を計算するときの条件の下では，その崩壊は無視できる程度である．その形を一度選んで決めてしまうと，

$$\varphi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r}, t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}-\mathrm{i}Et/\hbar}\chi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t-\boldsymbol{b})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{47}$$

となる（第10章（13））．

これらの初期条件によって定められた波動関数 $\Psi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t)$ は，衝突が終ってしまえば（$t \gg 0$）

$$\Psi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t) = \Phi(\boldsymbol{R}, t)[\varphi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r}, t) + \psi_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(\boldsymbol{r}, t)] \tag{48}$$

という形に書き表わされる．ただし，$\psi_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(\boldsymbol{r}, t)$ はひろがってゆく波束（第10章(20)）を表わし，

$$\psi_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(\boldsymbol{r}, t) \sim \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}-\mathrm{i}Et/\hbar}\chi[\boldsymbol{u}(r-vt)+\boldsymbol{s}-\boldsymbol{b}]\, f(\theta, \varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}. \tag{49}$$

われわれは重心系にいるから，波束 $\Phi(\boldsymbol{R}, t)$ は原点に集中しており，$\Omega \equiv (\theta, \varphi)$ 方向への粒子1の散乱断面積 $\sigma^{(1)}(\Omega)$ は同じ方向への相対粒子の散乱断面積に等しい．すなわち（第10章，§6）

$$\sigma^{(1)}(\Omega) = |f(\theta, \varphi)|^2. \tag{50}$$

粒子2の Ω 方向への散乱断面積 $\sigma^{(2)}(\Omega)$ は反対方向への相対粒子の散乱断面積に等しい．すなわち

$$\sigma^{(2)}(\Omega) = |f(\pi-\theta, \varphi+\pi)|^2. \tag{51}$$

二つの粒子が同種であるときには，この取り扱いにつぎの二つの重要な修正を加えなけ

↘重心の運動は事実上何の役割をも果たさないから，これら二つの操作は混同しやすいかも知れない．双方とも相対粒子の波動関数に対して同じ効果をもたらすからである．

(11) 厳密に言えば，2粒子が衝突に入る瞬間より前には粒子間の相互関係がないから，初期状態は（3）型の積で表わされるはずである．$\Phi\varphi$ 型の積が（3）の形に書き表わされるのは，波 Φ および φ が特殊な形をしているときに限られる．

例： $\Phi\varphi \propto \exp\,[\mathrm{i}\{(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R})+(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\}-a\{4(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}_0)^2+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)^2\}]$.

しかし実際上，断面積の計算は初期波束の特殊な形に無関係であり，$\Phi\varphi$ 型の波束から出発することによって生じる誤差は無視できる程度である．第10章，§7の議論においても，このことを暗黙のうちに認めている．

ればならない.

a)　検出装置は粒子1と2を区別せず，その結果として断面積 $\sigma(\Omega)$ を定義しなおす必要が生じる.

b)　関数 $\Psi_{\boldsymbol{b}}$ を正しく対称化しなければならない.

修正 a) は量子力学に固有のものではない. われわれは便宜上，単位時間と単位入射流束につき立体角 $(\Omega, \Omega+\mathrm{d}\Omega)$ のなかに放出される粒子（1および2）の個数として $\sigma(\Omega)$ を定義する. すなわち ((5) を参照)

$$\sigma(\Omega) = \sigma^{(1)}(\Omega) + \sigma^{(2)}(\Omega). \tag{52}$$

この定義を採用し，全断面積 $\sigma^{(\mathrm{tot})}$ については従来の定義を保存し，単位時間と単位入射流束につき入射ビームが失う粒子の個数とすれば，

$$\sigma^{(\mathrm{tot})} = \frac{1}{2}\int \sigma(\Omega)\,\mathrm{d}\Omega \tag{53}$$

となることに十分注意しなければならない.

これに反して修正 b) は量子論に特有の性格をもつ. 正しく対称化され，$\Psi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t)$ と同じ初期条件を満たす波束は

$$\hat{\Psi}_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}, t) \pm \Psi_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{R}, -\boldsymbol{r}, t)]$$

である. 実際，衝突前 $(t \ll 0)$ には，この関数 $\hat{\Psi}_{\boldsymbol{b}}$ は $\Phi(\boldsymbol{R}, t)\hat{\varphi}_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r}, t)$ という形をとり，

$$\hat{\varphi}_{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{r}, t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}-\mathrm{i}Et/\hbar}\frac{1}{\sqrt{2}}[\chi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t-\boldsymbol{b})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \pm \chi(-\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t-\boldsymbol{b})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}]$$

である (式 (47)). それゆえ，$\Phi\hat{\varphi}$ は二つの波の和である. 第一の波が重心系に関して表わす状態は，粒子1が相対速度 $\boldsymbol{v}$ と衝突パラメータ $\boldsymbol{b}$ をもって粒子2に向かってゆく衝突の初期状態である. 第二の波が表わすのは，同じ状態に対して粒子1と2の役割を取りかえたものである. これら二つの波は互いに重ならず ($t \ll 0$ であるから)，それぞれ1/2のノルムをもつから，$\Phi\hat{\varphi}$ は $\Phi\varphi$ と同様ノルム1の関数であり，この関数が表わす二つの粒子はそれらの重心系に関して相対速度 $\boldsymbol{v}$ と衝突パラメータ $\boldsymbol{b}$ をもち，互いにぶつかる方向に伝播する.

衝突後には，$\hat{\Psi}_{\boldsymbol{b}}$ が $\Psi_{\boldsymbol{b}}$ と同様2項の和の形に書き表わされる (式 (48) を参照). 第1項 $\Phi\hat{\varphi}$ は透過波を表わし，断面積の計算に入ってこない. 第2項 $\Phi\hat{\varphi}^{(d)}$ は散乱波を表わし，これを $\Phi\varphi^{(d)}$ から導き出すには，$\Psi_{\boldsymbol{b}}$ から $\hat{\Psi}_{\boldsymbol{b}}$ へ移ったときと同じ対称化の手続きを $\varphi^{(d)}$ に対してとればよい. すなわち

$$\hat{\varphi}_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(\boldsymbol{r}, t) \pm \varphi_{\boldsymbol{b}}^{(d)}(-\boldsymbol{r}, t)].$$

漸近式 (49) を参照すれば，$\Phi\varphi^{(d)}$ から $\Phi\hat{\varphi}^{(d)}$ に移るためには，散乱振幅 $f(\theta, \varphi)$ を対称

化振幅

$$\hat{f}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2}}[f(\theta,\varphi)\pm f(\pi-\theta,\varphi+\pi)]$$

に置き換えればよいことがわかる．散乱波束の式から散乱断面積を導き出すには，２粒子が異なる場合と同じ手続きによる．結果は

$$\sigma^{(1)}(\Omega)=|\hat{f}(\theta,\varphi)|^2=\frac{1}{2}|f(\theta,\varphi)\pm f(\pi-\theta,\varphi+\pi)|^2$$

$$\sigma^{(2)}(\Omega)=|\hat{f}(\pi-\theta,\varphi+\pi)|^2=\sigma^{(1)}(\Omega).$$

これから定義 (52) によって，

$$\sigma(\Omega)=2|\hat{f}(\theta,\varphi)|^2=|f(\theta,\varphi)\pm f(\pi-\theta,\varphi+\pi)|^2. \tag{54}$$

シュレーディンガー方程式

$$\frac{\hbar^2}{m}(\triangle+k^2)\psi(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})$$

の定常解の漸近式は $\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+f(\theta,\varphi)\dfrac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}$ であり，散乱振幅 $f(\theta,\varphi)$ は出てゆく波の係数になっていることを思い出そう．

対称化散乱振幅 $\hat{f}(\theta,\varphi)$ は，取り扱っているのがボース粒子であるかフェルミ粒子であるかによって，$f(\theta,\varphi)$ の偶関数部の $\sqrt{2}$ 倍または奇関数部の $\sqrt{2}$ 倍に等しい(*)． V が中心力ポテンシャルであるとき，$f(\theta)$ の偶関数部は偶数位の部分波による寄与の和であり，奇関数部は奇数位の部分波による寄与の和である．エネルギーが十分低く，s 波の寄与だけが問題になるとき，二つの（スピンのない）フェルミ粒子は事実上互いに散乱を受けず，二つのボース粒子の散乱断面積は，これらを異なる粒子とみなしうる場合の４倍になる（散乱振幅が $\sqrt{2}$ 倍され，断面積はこの対称化振幅の二乗の大きさを２倍したものに等しい；この二つの効果で乗数４が出る）．

§ 10.　二つの陽子の衝突

前の§9の取り扱いは，スピンをもつ同種粒子の衝突にも容易に拡張される．一例として，相互作用ポテンシャルが中心力だけによるという仮定の下に，二つの陽子の衝突を調べよう．２陽子の全スピンは運動の定数であるが，１重項状態と３重項状態では相互作用が同じであるとは限らない．１重項状態と３重項状態に対応する（対称化されていない）

(*)［訳注］著者は

$$f_0(\theta,\varphi)\equiv\frac{f(\theta,\varphi)+f(\pi-\theta,\varphi+\pi)}{2},\quad f_1(\theta,\varphi)\equiv\frac{f(\theta,\varphi)-f(\pi-\theta,\varphi+\pi)}{2}$$

をそれぞれ $f(\theta,\varphi)$ の partie paire (英語 even part)，partie impaire (odd part) と呼んでいる．ここでは“偶関数部”，“奇関数部”と訳しておく．

散乱振幅をそれぞれ $f_s(\theta)$ と $f_t(\theta)$ で表わす.

陽子はフェルミ粒子であるから，2陽子系を記述する波動関数はこれら二つの粒子の交換に対して反対称でなければならない．この関数が3重項状態を表わすときは，スピンの交換に対して対称であるから，$r^{(1)}$ と $r^{(2)}$ の交換に対して反対称であり，対称化された散乱振幅は $\hat{f}_t(\theta)=[f_t(\theta)-f_t(\pi-\theta)]/\sqrt{2}$ である．それゆえ，3重項状態にある二つの陽子の相互散乱断面積は

$$\sigma_t(\Omega) = 2|\hat{f}_t(\theta)|^2 = |f_t(\theta)-f_t(\pi-\theta)|^2$$

である．この関数が1重項状態を表わすときには，スピンの交換に対して反対称であるから，空間座標の交換に対しては対称であり，対称化された散乱振幅は $\hat{f}_s(\theta) = [f_s(\theta)+f_s(\pi-\theta)]/\sqrt{2}$ である．それゆえ，1重項状態にある二つの陽子の相互散乱断面積は

$$\sigma_s(\Omega) = 2|\hat{f}_s(\theta)|^2 = |f_s(\theta)+f_s(\pi-\theta)|^2$$

である．偏りのない陽子群から成る標的を，偏りのない陽子から成るビームにさらすとき，一つ一つの衝突において，入射陽子と標的陽子のスピンの方向は偶然によって決められる．3重項状態の空間は3次元，1重項状態の空間は1次元であるから，初期全スピンが3重項である確率と1重項である確率はそれぞれ3/4と1/4である．これから

$$\begin{aligned}\sigma(\Omega) &= \frac{3}{4}\sigma_t(\Omega)+\frac{1}{4}\sigma_s(\Omega)\\ &= \frac{3}{4}|f_t(\theta)-f_t(\pi-\theta)|^2+\frac{1}{4}|f_s(\theta)+f_s(\pi-\theta)|^2. \end{aligned} \tag{55}$$

特に，力がスピンに無関係であるときは，

$$f_s(\theta) = f_t(\theta) = f(\theta)$$

であり，計算をすっかり済ませると，

$$\sigma(\Omega) = |f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2-\frac{1}{2}[f^*(\theta)f(\pi-\theta)+f(\theta)f^*(\pi-\theta)] \tag{56}$$

が得られる．特に，十分低いエネルギーの状態にあるため，核力の効果を無視し，$V(r)$ を単なる斥力クーロン・ポテンシャル e^2/r として扱うことができる場合には，振幅 $f(\theta)$ は第11章の (33) で与えられ，散乱断面積は**モットの公式**

$$\sigma(\Omega) = \left(\frac{e^2}{4E}\right)^2\left[\sin^{-4}\frac{\theta}{2}+\cos^{-4}\frac{\theta}{2}-\sin^{-2}\frac{\theta}{2}\cos^{-2}\frac{\theta}{2}\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\log\left(\tan^2\frac{\theta}{2}\right)\right)\right] \tag{57}$$

によって与えられる．ただし，E は重心系におけるエネルギー，v は二つの陽子の相対速度である．この公式をラザフォードの公式（第11章 (36)）と比較すれば，教えられることが多い．

古典的な計算によるならば，モットの公式の初めの2項

$$\sigma_{\mathrm{cl.}}(\Omega) = \left(\frac{e^2}{4E}\right)^2\left[\sin^{-4}\frac{\theta}{2}+\cos^{-4}\frac{\theta}{2}\right]$$

しか得られないであろう．

第3項は散乱振幅 $f(\theta)$ と $f(\pi-\theta)$ のあいだの干渉という純量子的効果によるものである．$e^2/\hbar v \gg 1$ のとき，この項は0のまわりの激しい振動を生じさせて，この振動は角 $\theta=\pi/2$ から（どちらの方向にも）遠ざかるほど稠密さを増す．$\hbar\to 0$ になる極限において，この振動は同じ振幅を保つがますます稠密になり，小さいけれども0ではない立体角 $\delta\Omega$ の範囲で $\sigma(\Omega)$ の平均値をとれば，この値は断面積 $\sigma_{\mathrm{cl.}}(\Omega)$ に近づく．

§ 11. 原子核の統計

どのような原子核も場合により，あるスピン j をもつ粒子と同じように取り扱うことができる．

原子物理学のすべての問題において，この考え方は非常によい近似を与える．それがどういうことであるかをよく理解するために，一つの原子核を考えよう．これはある個数 $\mathcal{N}$ の核子，すなわち Z 個の陽子と N 個の中性子 $(\mathcal{N}=Z+N)$ から成る一つの集合体である．核の力学変数は，これら $\mathcal{N}$ 個の構成要素に対する基本変数の関数である．核の重心の位置と運動量（第9章，§13を参照）を $\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P}$ とし，内部変数の全体を ρ とする．内部変数とは，核子のスピンおよび核子の一つ一つが他の核子に対してもつ相対位置と相対運動量である．これらのなかには，特に内部変数の全角運動量 $\boldsymbol{j}$ が現われる．普通これを**核スピン**と名づけている．$\boldsymbol{j}$ は $\mathcal{N}$ 個の核子のスピンと $(\mathcal{N}-1)$ 個の相対軌道角運動量の和である(*)．角運動量の合成に関する法則にしたがえば，$\mathcal{N}$ が偶数であるか奇数であるかによって，j のとりうる値は整数または半整数になる．

外部の場がないときには，重心の運動がそれ以外のものから分離され，系のハミルトニアンは二つの項の和になる．すなわち重心の運動エネルギー $\boldsymbol{P}^2/2M$（M は核の全質量）と内部エネルギー $\boldsymbol{h}(\rho)$ であり，後者は核子の運動エネルギーと相互作用エネルギーから成る．$\boldsymbol{h}$ はいくつかの束縛状態をもつ．基底状態の固有値を ε_0 で表わす．核子間の力は回転により不変であるから，$\boldsymbol{h}(\rho)$ は $\boldsymbol{j}$ の三つの成分と交換する（第13章を参照）．そのたびごとのスペクトルに属する各固有値は，はっきり決まったスピンの値 j に対応し，$(2j+1)$ 位の縮退をもつ．今後は基底状態のスピンを j で表わし，j_z のとりうる値を μ $(\mu=-j, -j+1, \cdots, +j)$，角運動量 $(j\mu)$ をもつ基底状態の固有関数を χ_μ で表わす．すなわち

$$\boldsymbol{h}(\rho)\chi_\mu = \varepsilon_0\chi_\mu, \qquad j_z\chi_\mu = \mu\chi_\mu.$$

$(2j+1)$ 個のベクトル χ_μ は向きを異にするだけである．これらは j_+ または j_- を繰り返し適用することによって互いに導かれ，ベクトル演算子 $\boldsymbol{j}$ の表現に対する一つの基底をつくる．実際問題として，核の半径は 10^{-13} から 10^{-12} cm の程度であり，したがって状態 χ_μ

(*) ［訳注］　ここの《相対》は《重心に関する》という意味である．重心座標を分離した残りの系は $\mathcal{N}-1$ 個の粒子と同等なので，相対軌道角運動量の個数も $\mathcal{N}-1$ となる．

にある核の核子間の距離は平均してこの程度の長さをもつ.

核が基底状態にある限り, 系の波動関数は $\sum_{\mu}\psi(\boldsymbol{R},\mu)\chi_{\mu}$ という形であり, これをスピン j の1粒子とみなし, 表現 $\{\boldsymbol{R}, j_z\}$ におけるその波動関数を $\psi(\boldsymbol{R},\mu)$ とすることが厳密に正当化される. $h(\rho)$ はハミルトニアンのなかで定数 ε_0 に置き換えられ, $\psi(\boldsymbol{R},\mu)$ の時間的変化は, 質量 M の自由粒子の波動関数の変化とまったく同じである (何の物理的意味もない定数の位相因数は除く).

外部の場, たとえばポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ の電磁場のなかにある核を考える. ハミルトニアンはいままでに述べた項のほかに, Z 個の陽子と外部の場との相互作用のポテンシャルを含み, スピン j の1粒子と同一視するのはもはや近似でしかなくなる. それはハミルトニアンが $h(\rho)$ と交換しなくなるからである. それにもかかわらず, 核の半径程度の距離で場の値がすこししか変わらない場合は, 各陽子の位置における場の値を重心の位置における値に置き換えられるから, 上の方法は非常によい近似である. このとき外部からの相互作用は $ZeV(\boldsymbol{R})$ と書かれ, ハミルトニアンは $\sum_{\mu}\psi(\boldsymbol{R},\mu)\chi_{\mu}$ の形の固有状態をもつ. ただし $\psi(\boldsymbol{R},\mu)$ は, 質量 M, スピン j, 電荷 Ze をもち, 静電ポテンシャル $V(\boldsymbol{R})$ のなかにある粒子の定常状態である[12].

n 個の核を含む系を考える. これらの核はすべて基底状態にあると仮定し, その一つ一つを, 与えられたスピンをもつ粒子として取り扱う. 分子あるいは固体の核の場合のように, 核が互いに十分離れている限り, この近似は完全に正しい. i 番目の核の位置を $\boldsymbol{R}^{(i)}$ で表わし, そのスピンの Oz 方向の成分を $\mu^{(i)}$ で表わせば, 系の波動関数は $\boldsymbol{R}^{(i)}$ と $\mu^{(i)}$ の関数であり, その変化は変数 $\boldsymbol{R}^{(i)}, \boldsymbol{P}^{(i)}, \boldsymbol{j}^{(i)}$ に依存するハミルトニアンによって支配される.

このように単純化された記述に対して, 対称化の要請がどの程度まで影響するかを調べる. 明らかに——また§8のときと同じような議論で確かめることもできるが——系が同種の核を含む場合を除けば, この要請は問題にならない. 二つの核が異なる場合は, これを構成する要素, すなわち中性子と陽子は同種であるにもかかわらず, これらは区別できる粒子である.

そこでスピン j をもつ二つの同種の核から成る系を考える. この系の状態は波動関数 $\psi(\boldsymbol{R}^{(1)}, \mu^{(1)}; \boldsymbol{R}^{(2)}, \mu^{(2)})$ によって書き表わされる. 二つの核の交換は

$$P\psi = \psi(\boldsymbol{R}^{(2)}, \mu^{(2)}; \boldsymbol{R}^{(1)}, \mu^{(1)})$$

によって定められる演算 P である. 実際には $2Z$ 個の陽子と $2N$ 個の中性子がこの系に含まれ, 系の力学的状態は, ベクトル

(12) この近似に対する最初の補正においても, このような原子核のイメージは変わらない. この補正によって原子核に付け加えられるのは, $\boldsymbol{j}$ の成分の関数として表わされる4重極モーメントである ($j > 1/2$ の場合). ここで4重極効果は核のスピンと外部の場との相互作用と解釈される.

$$\Psi = \sum_{\mu_1\mu_2} \psi(\boldsymbol{R}^{(1)}, \mu_1;\ \boldsymbol{R}^{(2)}, \mu_2)\chi^{(1)}_{\mu_1}\chi^{(2)}_{\mu_2}$$

を陽子に関し，また中性子に関して反対称化することによって得られる．演算 P は第一の核の陽子および中性子をもう一つの核の陽子および中性子と交換すること，すなわち全部で $\mathfrak{N}$ 個の互換（の積）である．この状態ベクトルは正しく反対称化されており，一つの互換によって符号を変えるから，$P\Psi = (-)^{\mathfrak{N}}\Psi$，したがって，

$$P\psi = (-)^{\mathfrak{N}}\psi$$

であることが導かれる．このことは3個以上の同種核を含む系にも容易に一般化される．系の波動関数が同種核の置換に関して対称であるか反対称であるかは，核が偶数個の核子を含むか奇数個の核子を含むかによって決まる．

言葉を変えると，原子核は

a)　偶数個の核子を含むときボース粒子

b)　奇数個の核子を含むときフェルミ粒子

である．

核だけに起因する効果が何の役割をも果たさないと思われる多くの現象においては，これらの統計の差異が顕著に現われる．特に指摘したいのは，ごく低い温度における液体ヘリウム He^4 の注目すべき性質である．He^4 はボース=アインシュタイン統計にしたがうが，同位核 He^3 はフェルミ=ディラック統計にしたがい，低温において根本的に異なる挙動を示す．

もう一つの例は等核二原子分子の帯スペクトルであるが，これについてはのちにたち帰る機会（第18章，§17）があろう．

§ 12.　複雑な原子．中心力場による近似

パウリの原理は複雑な原子のスペクトル構造に深い影響を与える．

外部の場がないとき，Z 個の電子をもつ原子のハミルトニアンは第13章の式（71）で与えられる．これは電子のスピンに無関係な演算子である．厳密に言えば，スピン-軌道相互作用の項を付け加えなければならないが，目下の議論ではこれを無視することができる．水素原子（$Z=1$）という特殊な場合を除けば，この型のハミルトニアンについて固有値問題を厳密に解くことはできない．

原子の定常状態を決定するため普通用いられるのは，独立粒子による近似つまり中心力場による近似である．この近似によれば，各電子は互いに独立に中心力ポテンシャル $V(r)$ のなかを動き，$V(r)$ は核の引力のほか，他の電子の斥力による平均効果を含む．明らかに，この平均効果は他の電子の力学的状態によって変わるから，同じ一つの $V(r)$

によって原子スペクトルの全体を表わすことは近似的にさえ不可能である．それにもかかわらず，基底状態と最初の励起状態の研究に限るならば，われわれは $V(r)$ を一つ選んで固定することができる．このポテンシャルをうまく選ぶほど近似はそれだけよくなる．大まかに言えば，電子群の効果は核による純クーロン場を〔部分的に〕遮蔽することに当たり，この効果は核から遠ざかるにつれていっそう顕著になる．$V(r)$ は原点の近くでは $-Ze^2/r$ のように振舞い，r が増すにつれてこの純クーロン形からだんだんずれてゆき，漸近区域では $-e^2/r$ のように振舞う．差し当たってはこの半定量的な手掛りで十分である．$V(r)$ の系統的な二つの決め方，すなわちトーマス=フェルミの方法（§13）とハートレー=フォック=ディラックの方法（第18章）はあとで説明される．

中心力場による近似においては，ハミルトニアンは

$$H = h^{(1)} + h^{(2)} + \cdots + h^{(Z)}, \tag{58}$$

ただし

$$h = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

と書き表わされる．H の固有ベクトルは $Z \times Z$ 型のスレイター行列式であり，これは h の基底系に属するベクトルによってつくられる．与えられたスレイター行列式に対応する H の固有値は，この行列式に現われる Z 個の1粒子状態のエネルギーの和に等しい．それゆえ，1粒子ハミルトニアン h に関する固有値問題の解がわかれば，H に関する固有値問題は容易に解決される．

h はスピン1/2の1粒子がスピンに無関係な中心力ポテンシャルのなかにあるときのハミルトニアンである．スピンのない粒子に対する固有値問題の解法は第9章で与えた．スピンの効果は，各準位の縮退を2倍にするだけである．h, l^2, l_z, s_z は交換するオブザーバブルの完全集合をつくり，その基底ベクトル $|nlm_lm_s\rangle$ は四つの量子数 n, l, m_l, m_s によってしるしづけられる．m_s はスピン量子数で，$+1/2$，$-1/2$ の値をとりうる．n は主量子数で，その定義は水素原子の問題のときと同じである（動径関数の節の数は $n-l-1$ である）．各状態の固有エネルギー ε_{nl} は n と l だけで決まるから，各1粒子準位は $2(2l+1)$ 重に縮退している．

エネルギー・スペクトルの準位列 ε_{nl} の順序はポテンシャル $V(r)$ の形によってそれほど決定的な影響を受けない．与えられた l の値に対して，それらは n の増す順に並べられる．$V(r)$ が核のクーロン場だけになっているならば，同じ n の値に対応する準位（$l = 0, 1, \cdots, n-1$）はすべて一致するであろう（第11章，11·1図を参照）．他の電子による遮蔽の効果は，これらの準位をすべて引き上げることと解釈され，その電子が核から平均して遠ざかるほど，したがって二つの数 n と l が大きくなるほど準位の上昇はいちじるしくなる．原子の基底状態と最初の励起状態を調べることに限れば，1粒子準位の列の順序は

実際上すべての原子に対して同じである．すなわち

$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$[4s, 3d]$	$4p$	$[5s, 4d]$	$5p$	$[6s, 4f, 5d]$	$6p$	$[7s, 5f, 6d]$
2	2	6	2	6	2+10	6	2+10	6	2+14+10	6	2+14+10

括弧のなかの準位はほとんど同じであって，それらの順序は原子ごとに変わりうる．この表の各項の下にある数は，各項が表わす準位の縮退の位数である．

Z 個の異なる1粒子状態から成る集合の一つ一つに，一つのスレイター行列式，したがってこの原子の一つの定常状態が対応する．この状態のエネルギーは，それを構成する1粒子状態のエネルギーの和であるから，各準位 ε_{nl} を占める電子の個数だけで決まる．各1粒子準位を占める〔電子の〕個数を与えることによって一つの配置が定められる．この定義によれば，同じ配置に対応する状態は同じエネルギーをもつ．

準位 ε_i を占める電子の個数を ν_i とする．ν_i は最も大きい場合でもこの準位の縮退の位数 g_i に等しい．$\nu_i = g_i$ のとき，これらの電子は**閉殻** (closed shell) をつくると言い，$\nu_i < g_i$ のときこの殻は**不完全**であると言う．この準位には g_i 個の1粒子状態が用意されており，そこへ ν_i 個の電子を割り当てる方法は $g_i!/\nu_i!(g_i-\nu_i)!$ 通りある．したがって，すべての配置ではないが，ほとんどすべての配置は縮退をもつ．縮退のない配置は閉殻のみから成る配置だけである．

最も低いエネルギー準位に Z 個の電子を割り当てることにより，基底配置がつくられる．したがって基底配置においては，最初の h 個の準位が定まり，それらの準位に対する h 個の殻に Z 個の電子が割り当てられている．そして低い準位に対する $(h-1)$ 個の殻は閉じており，h 番目の殻は一般には閉じておらず，これも閉じるのは，Z がごく特殊な値 ($Z = 2, 4, 10, 12, 18,$ など) をとるときに限る．

一例として炭素原子 ($Z=6$) を考えよう．基底配置においては，$1s$ 殻と $2s$ 殻は閉じており，残りの2電子が $2p$ 殻にある．$2p$ 殻に用意された6個の状態にこれらの2電子を割り当てる方法は ${}_6C_2 = 15$ 通りだけ異なったものがあるから，炭素原子の基底状態は(独立粒子による近似で) 15重に縮退している．ネオン ($Z=10$) の場合には，基底状態において $1s, 2s, 2p$ 殻が閉じている．この状態は縮退していない．

最も低い殻にある電子はまた，核に最も近い電子である．原子の化学的性質は実際上これらの電子の運動には無関係である．化学反応に関与する低エネルギーにおいては，原子間の相互作用は主として――それだけというのではないが――各原子の外側の殻にある電子によって決まる．それゆえ，二つの原子の外側の殻が同じような電子構造をもつとき，これらの原子の化学的性質は似ている．たとえば，大気中の稀ガス (Ne, A, Kr, Xe) の外側の殻はいずれも閉じた p 殻である．ハロゲン族 (F, Cl, Br, I) のそれは p 殻で，閉じるためには1電子足りない．アルカリ金属 (Na, K, Rb, Cs) のそれは1電子を含む s 殻であ

り，それよりエネルギー準位の一段低い閉殻が p 殻である．まったく一般に，どの化学元素に対しても，電子殻の列の順序がわかれば，メンデレーエフの周期表においてその元素の占める場所を容易に言い当てることができる(13)．

§ 13.　トーマス=フェルミの原子模型

$Z \gg 1$ のときには，トーマスとフェルミによる半古典的方法を適用することにより，基底状態に対するポテンシャルを定めることができる．

この原子が基底状態にあるとき，体積要素 $(r, r+\mathrm{d}r)$ のなかに電子を見いだす確率の密度を $\rho(r)$ とする．この関数は球対称性をもつと仮定する．そのとき規格化条件

$$4\pi\int_0^\infty \rho(r)r^2\mathrm{d}r = Z \tag{59}$$

が満たされる．

Z 個の電子の全体は核のまわりに負の電気をもつ雲をつくり，その密度は平均して $-e\rho(r)$ に等しい．原子のなかに分配された電荷の全体は，その結果一つの平均静電ポテンシャル $\Phi(r)$ をつくる．その起源はつぎの二つである．

i）　原点にあり，Ze に等しい核の点電荷．

ii）　密度 $-e\rho(r)$ をもつ連続的な電気分布．

言いかえれば，Φ はポアッソンの方程式

$$\triangle\Phi \equiv \frac{1}{r}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r\right)\Phi = 4\pi e\rho \tag{60}$$

の解で，原点における挙動

$$\lim_{r\to 0} r\Phi = Ze \tag{61}$$

をもつものである．

$Z \gg 1$ となる極限においては，一つの電子による電場は他のすべての電子による場にくらべて小さい．それゆえ，独立粒子による近似において，各電子を支配するポテンシャルは $-e\Phi(r)$ で表わされる．

---

(13) 量子論による原子の化学的性質の説明に関してもっと詳しく知るには，M. Born, *Atomic physics*, 第 6 版，Blackie, Glasgow, 1957 (邦訳；ボルン《現代物理学》鈴木・金関訳，みすず書房)；L. Pauling, E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw–Hill, New York, 1935 (好学社版リプリントあり) (邦訳；ポーリング，ウィルソン《量子力学序論》桂井・坂田・玉木・徳光訳，白水社) を見よ．原子スペクトルの一般論については，E. U. Condon と G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, 第 4 版，1957 (ペーパーバックスの廉価版が Dover 社から出ている)；G. Racah, *Phys. Rev.*, **62** (1942), 438 および **63** (1943), 367 を見よ．

この原子の基底状態においては，質量 m の粒子が場 $-e\Phi$ のなかで占めうる量子的状態のうち，Z 個の最も低いエネルギーの状態を Z 個の電子が占めている．それゆえ，密度 $\rho(r)$ は初めの Z 個の状態の密度 $|\phi|^2$ の和である．当然，$\rho(r)$ とポテンシャル $-e\Phi$ のあいだには関数関係がある．これを決めるために，つぎの《半古典》近似を用いる．

古典的な極限において，エネルギー帯 $(\varepsilon, \varepsilon+\delta\varepsilon)$ にある定常状態の個数は，これに対応する古典粒子の位相空間のなかで同じエネルギー帯が占める体積に比例する．比例定数は $2/h^3$ であり，第6章の§11で得たものの2倍になっている．それは，電子がスピンの異なる二つの状態をとりうるからである．それゆえ，最初の Z 個の量子的状態を電子が占めるとき，原子のなかの電子のエネルギー分布は，Z 個の古典電子から成る統計的混合系の場合と同じであり，その位相空間における密度 $n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ は

$$n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \begin{cases} \dfrac{2}{h^3} & \left(\varepsilon \equiv \dfrac{p^2}{2m} - e\Phi < \varepsilon_0 \text{ のとき}\right) \\ 0 & (\varepsilon > \varepsilon_0 \text{ のとき}). \end{cases} \tag{62}$$

ε_0 は電子が占める最後〔すなわち最高〕の状態のエネルギーである．エネルギーの零点は任意に定められるから，今後は $\varepsilon_0 = 0$ と置こう．

議論には立ち入らず，原子内電子の空間的分布 $\rho(\boldsymbol{r})$ は古典統計的混合系の場合と同様

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \int n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})\,\mathrm{d}\boldsymbol{p} = \frac{2}{h^3}\int_{\varepsilon<0} \mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

であることを承認する．ε を $\boldsymbol{p}$ と Φ の関数として表わす式に置き換えれば，簡単な積分計算の結果，

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} \dfrac{8\pi}{3h^3}(2me\Phi)^{3/2} & (\Phi > 0 \text{ のとき}) \\ 0 & (\Phi < 0 \text{ のとき}) \end{cases} \tag{63}$$

となる．この式を (60) の右辺に代入すれば，Φ に関する2階の微分方程式が得られる．条件 (59) と (61) によってこの関数は完全に定められる．関係式 (61)，(63)，(59)，(62) がトーマス=フェルミ模型の基本関係式である．

これらの関係式から Φ と ρ を導き出すには，変数と関数の変換

$$r = Z^{-1/3}bx, \qquad \Phi = \frac{Ze}{r}\chi \tag{64}$$

を施すとつごうがよい．ここで b は

$$b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0.5\times10^{-8}\,\mathrm{cm} \tag{65}$$

である．(63) から，ρ を次元のない量 χ および x の関数として表わす式

$$\rho = \begin{cases} \dfrac{Z^2}{4\pi b^3}\left(\dfrac{\chi}{x}\right)^{3/2} & (\chi > 0 \text{ のとき}) \\ 0 & (\chi < 0 \text{ のとき}) \end{cases} \tag{66}$$

が得られる．基本方程式 (60) は方程式

$$\frac{d^2\chi}{dx^2}=\begin{cases} x^{-1/2}\chi^{3/2} & (\chi>0 \text{ のとき}) \\ 0 & (\chi<0 \text{ のとき}) \end{cases} \tag{67}$$

に同値である．条件 (61) により $\chi(0)=1$ である．方程式 (67) の形そのものから，$\chi(x)$ が区間 $(0,\infty)$ においてたかだか 1 個の零点しかもたないことがわかる．この零点の位置を x_0 とすれば，χ は区間 $(0, x_0)$ において確かに正であり，区間 (x_0, ∞) において負である．それゆえ，(64) と (66) および微分方程式 (67) を考慮して条件 (59) を書き直すと，

$$1=\int_0^{x_0}\sqrt{x}\,\chi^{3/2}dx=\int_0^{x_0}x\chi''dx=x\chi'-\chi\Big|_0^{x_0}=x_0\chi'(x_0)+1.$$

この条件によって，導関数 χ' は χ と同じ点で 0 になる．このことは，点 x_0 を無限遠に遠ざけることに等しい(*).

結局 $\chi(x)$ は

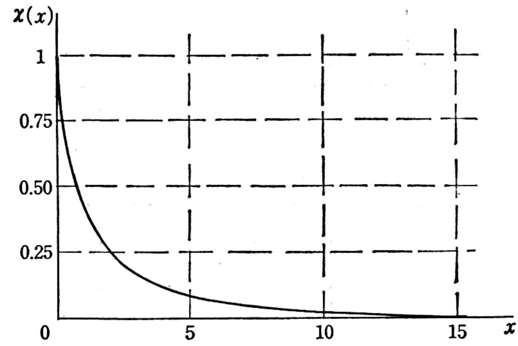
$$\chi''=x^{-1/2}\chi^{3/2} \tag{68}$$

の解で，条件

$$\chi(0)=1,\quad \chi(\infty)=0 \tag{69}$$

を満たすものである．

普遍的な法則 $\chi(x)$ は数値積分によって決める必要がある．14・1 図は曲線 $\chi(x)$ を表わす．$\chi(x)$ がわかれば，定義 (64)—(66) を使って，どんな Z の値に対しても関数 $\rho(r)$ と $\Phi(r)$ が導き出される．



14・1 図　トーマス＝フェルミの関数 $\chi(x)$：$\chi''=x^{-1/2}\chi^{3/2}$, $\chi(0)=1$, $\chi(\infty)=0$.

古典近似が正しいためには，Z 個の電子の個別的状態のうち大部分が《量子数の大きな領域》のなかにあること，したがって $Z\gg 1$ が必要である．与えられた原子に対して，トーマス＝フェルミ模型が定める電子密度 $\rho(r)$ および静電ポテンシャル $\Phi(r)$ は，特有の長さ $\hbar^2/me^2$ と電子雲の全電荷 $(-Ze)$ を一定に保ちながら，作用量子 $\hbar$ と各電子の電荷 $(-e)$ を限りなく小さくし，核のまわりを回る電子の個数 Z を限りなく大きくした極限において得られるものである(14).

(*) ［訳注］ x_0 において $\chi(x_0)=\chi'(x_0)=0$ ならば，これを初期条件とする (67) の解が定まり $\chi(x)=0$. これは $\chi(0)=1$ と矛盾する．

(14) トーマス＝フェルミの方法は原点の近く $(r\lesssim b/Z)$ と漸近領域 $(r\gg b)$ において電子密度を過大に評価する．原点で $\rho(r)$ は $r^{-3/2}$ のように発散して有限にとどまらず，無限遠で $\rho(r)$ は r^{-6} のように 0 に近づき，指数関数のようには近づかない．

トーマス=フェルミ模型から原子の半径に対する一つの評価を導くことができる．この半径の定義にはいくらかの任意性がある．実際，電子密度は無限遠でしか0にならないから，原子ははっきり区切られた空間領域を占める対象ではない．われわれは原点を中心とする球を考え，この原子に属する Z 個の電子のうち $(1-\alpha)Z$ 個が含まれるときの半径 $R(\alpha)$ を原子の半径と呼ぶ．$(1-\alpha)$ は与えられた比である．この定義によれば，

$$(1-\alpha)Z = 4\pi\int_0^{R(\alpha)} \rho(r)r^2\,dr.$$

ここで

$$R(\alpha) = Z^{-1/3}bX(\alpha)$$

と置く．関係式 (64)，(66)，(68) を考えに入れれば，簡単な計算ののち X に対するつぎの方程式を得る：

$$\chi(X) - X\chi'(X) = \alpha.$$

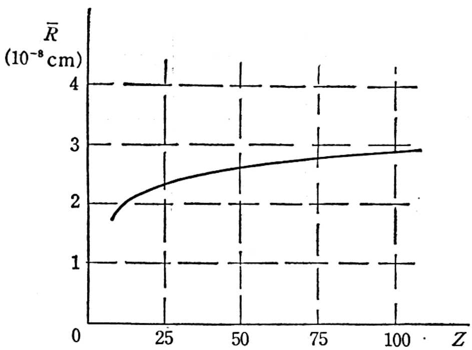
この方程式は数値的に解かなければならない．

すべての原子に対して同じ α の値を採用するならば，Xはすべての原子に対して同じであり，原子半径は $Z^{-1/3}$ に比例する．

$\alpha = 1/Z$ と置くならば，対応する半径

$$\bar{R} \equiv R\left(\frac{1}{Z}\right) = Z^{-1/3}bX\left(\frac{1}{Z}\right)$$

によって，1個を除いた残りの電子を全部含む球の半径が表わされる．14·2 図により Z の関数 $\bar{R}$ のグラフが与えられる．$\bar{R}$ が実際上 Z に無関係であることに注意する（$\bar{R} \simeq 2\sim3\times10^{-8}$ cm）．



14·2 図　トーマス=フェルミ原子の半径 $\bar{R}$ を Z の関数として表わす：

$$4\pi\int_0^{\bar{R}} \rho(R)r^2\,dr = Z-1.$$

§ 14.　核子系と荷電スピン

Z 個の陽子と N 個の中性子から成る系を考える．これの変化はあるハミルトニアン H によって支配される．中性子と陽子は相似粒子である．これらを互いに区別するため，陽子には1から Z までの番号をつけ，中性子には $Z+1$ から $Z+N\equiv\mathfrak{N}$ までの番号をつける．初めの Z 個の粒子の反対称化演算子を A_Z で表わし，あとの N 個の粒子のそれを

A_N で表わし，§2 –§4 の記号を用いる．

$$\varphi(q^{(1)}, q^{(2)}, \cdots, q^{(Z)}, q^{(Z+1)}, \cdots, q^{(\mathfrak{N})})$$

はこの系がとりうる力学的状態を対称表現 $\{Q\}$ において表わす波動関数であるとする．φ はつぎの反対称化の条件にしたがう．

$$A_N\varphi = \varphi, \qquad A_Z\varphi = \varphi. \tag{70}$$

Z 個の陽子と N 個の中性子から成るこの系を記述するためには，前に述べたものと厳密に同値なもう一つの形式がある．この形式では，中性子と陽子をもはや二つの異なる粒子とみなさず，**核子** という一つの粒子の異なる状態とみなす．問題の系は $\mathfrak{N}$ 個の核子から成り，そのうちの Z 個は陽子状態にあり，N 個は中性子状態にあるものとして記述される．$\mathfrak{N}$ 個の核子は同種のフェルミ粒子であり，系の力学的状態はこれら $\mathfrak{N}$ 個の同種フェルミ粒子の置換に関して反対称である．この§14 の目的は，この新しい形式を述べ，これと前の形式との同値性を証明することにある．

陽子状態と中性子状態とを区別するために，各核子に補助的な力学変数すなわち電荷を付け加える必要がある．電荷は二つの値をとることが許される．これらの値に対応する固有状態を $\boldsymbol{\varpi}$ および ν とし，$\boldsymbol{\varpi}$ は陽子状態，ν は中性子状態を表わすものとする．核子の荷電空間はスピン空間と同様に 2 次元の空間である．それゆえ，ここにはスピン空間に導入したのと同じような演算子を定義することができる．その数学的性質はスピン空間の演算子と同じである．特に，三つのパウリ行列を考えると，$\boldsymbol{\varpi}$ および ν を基底ベクトルとする表現において，これらの行列はベクトル $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ と同様なベクトル演算子 $\boldsymbol{\tau} \equiv (\tau_1, \tau_2, \tau_3)$ を荷電空間のなかに定める．ベクトル

$$\boldsymbol{t} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\tau} \tag{71}$$

はスピン $\boldsymbol{s}$ に類似のものであり，われわれはこれを核子の**荷電スピン**（**アイソスピン**ともいう）と名づけよう．これについて

$$t_3\boldsymbol{\varpi} = \frac{1}{2}\tau_3\boldsymbol{\varpi} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varpi}, \qquad t_3\nu = \frac{1}{2}\tau_3\nu = -\frac{1}{2}\nu$$

であることがわかる．陽子状態と中性子状態への射影子をそれぞれ $\Pi_{\boldsymbol{\varpi}}$ および Π_ν とすれば，

$$\Pi_{\boldsymbol{\varpi}} = \frac{1}{2}(1+\tau_3), \qquad \Pi_\nu = \frac{1}{2}(1-\tau_3) \tag{72}$$

と書き表わされ，核子の電荷は演算子

$$e\Pi_{\boldsymbol{\varpi}} = \frac{1}{2}(1+\tau_3)e$$

によって表わされる．$\mathfrak{N}$ 個の個別的荷電空間の積は $\mathfrak{N}$ 核子系の荷電空間 $\mathcal{E}_C$ である．系

の全電荷は演算子

$$C \equiv \sum_{i=1}^{\mathfrak{N}} e\Pi_{\varpi}^{(i)} = e\left(\frac{1}{2}\mathfrak{N}+T_3\right) \tag{73}$$

によって表わされる．ただし T_3 は全荷電スピン

$$\boldsymbol{T} = \sum_{i=1}^{\mathfrak{N}} \boldsymbol{t}^{(i)} \tag{74}$$

の第3成分である．

ベクトル ϖ または ν を $\mathfrak{N}$ 個掛けることによって，$\mathcal{E}_C$ のなかの直交規格化基底が一つ得られる．特に，基底ベクトル

$$\zeta = \varpi^{(1)}\varpi^{(2)}\cdots\varpi^{(Z)}\nu^{(Z+1)}\cdots\nu^{(\mathfrak{N})}$$

によって，最初の Z 個の粒子は陽子であり，終りの N 個は中性子であるという荷電状態が表わされる．今後は荷電状態が $C=Ze$，すなわち

$$T_3 = \frac{1}{2}(Z-N)$$

である場合だけを考える．この固有値に属する基底ベクトルは $(\mathfrak{N}!/Z!\,N!)$ 個つくられる．これらの基底ベクトルの一般形はベクトル

$$\zeta_\alpha = \varpi^{(\alpha_1)}\varpi^{(\alpha_2)}\cdots\varpi^{(\alpha_Z)}\nu^{(\alpha_{Z+1})}\cdots\nu^{(\alpha_{\mathfrak{N}})}$$

である．これは Z 個の粒子 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_Z$ が陽子であり，残りは中性子であるという状態を表わす．

電荷以外の力学変数の空間を $\mathcal{E}_0$ とするとき，$\mathfrak{N}$ 核子系のケットベクトルの空間は $\mathcal{E}_C$ と $\mathcal{E}_0$ のテンソル積によってつくられる．これら $\mathfrak{N}$ 個の核子を置換するということは，荷電変数およびその他の変数に対して同時に同じ置換を施すことである．すなわち，与えられた電荷の置換を P_C で表わし，他の変数に適用される同じ置換を P_0 で表わせば，全体の置換は演算子

$$P = P_0 P_C$$

によって表わされる．$\mathfrak{N}$ 核子系の反対称化演算子は演算子

$$A = \frac{1}{\mathfrak{N}!}\sum_P (-)^p P = \frac{1}{\mathfrak{N}!}\sum_P (-)^p P_0 P_C \tag{75}$$

である．電荷 Ze に対応する $\mathfrak{N}$ 核子系の力学的状態は空間 $\mathcal{E}_C \otimes \mathcal{E}_0$ のベクトル Φ で表わされ，Φ は反対称化の条件

$$A\Phi = \Phi \tag{76}$$

と方程式

$$T_3\Phi = \frac{1}{2}(Z-N)\Phi \tag{77}$$

にしたがう．

条件 (76) と (77) にしたがうベクトル Φ と，条件 (70) にしたがう $\mathcal{E}_0$ のベクトル φ のあいだには一対一の対応

$$|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\,A\,|\varphi\rangle|\zeta\rangle \tag{78}$$

$$|\varphi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\,\langle\zeta|\Phi\rangle \tag{79}$$

があり，この一対一対応によって内積が保たれることを示そう．

実際，ベクトル $|\varphi\rangle$ が条件 (70) にしたがうとする．これから公式 (78) によって導き出されるベクトル $|\Phi\rangle$ は明らかに (76) にしたがい，また T_3 は A と交換し，$T_3|\zeta\rangle=(Z-N)|\zeta\rangle/2$ であるから，$|\Phi\rangle$ は (77) にもしたがう．

部分内積(*) (79) をとればベクトル $|\varphi\rangle$ にもどることを示そう．まず

$$\sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\langle\zeta|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\langle\zeta\,|A|\Phi\rangle = \frac{1}{N!\,Z!}\sum_P (-)^p P_0|\varphi\rangle\langle\zeta|P_C|\zeta\rangle. \tag{80}$$

ところで，$\mathcal{N}!$ 個の置換は二つの種類に整理される．第一種の置換は最初の Z 個の粒子をそれらのなかで交換し，あとの N 個の粒子をそれらのなかで交換するものである．これを F で表わす．この種類に属する ($N!\,Z!$) 個の置換によってベクトル $|\zeta\rangle$ は不変であり，ベクトル $|\varphi\rangle$ には $(-)^f$ が掛けられる．すなわち

$$\langle\zeta|F_C|\zeta\rangle = 1, \qquad F_0|\varphi\rangle = (-)^f|\varphi\rangle.$$

第二種の置換は〔上記以外のものとし〕これを G で表わす．この置換によってベクトル ζ は列 ζ_α に属する別のベクトルに変換される．したがって

$$\langle\zeta|G_C|\zeta\rangle = 0.$$

その結果，(80) の右辺にある和は ($N!\,Z!$) 個の 0 でない項から成り，各項はすべて $|\varphi\rangle$ に等しい．こうして関係式 (79) が得られた．

終りに，$|\Phi\rangle$ と $|X\rangle$ がそれぞれ $|\varphi\rangle$ と $|\chi\rangle$ から対応 (78) によって導き出されたとすれば，この対応によって内積は保存される．実際，

$$|X\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\,A|\chi\rangle|\zeta\rangle$$

で，$|\Phi\rangle$ は性質 (76) と (78) をもつから，

(*) 〔訳注〕 $\mathcal{E}_C, \mathcal{E}_0$ の基底ベクトル系を一組ずつ定めて，それぞれ $|\zeta_i\rangle$, $|\varphi_j\rangle$ とすれば，$\mathcal{E}=\mathcal{E}_C\otimes\mathcal{E}_0$ のベクトル $|\Phi\rangle$ は

$$|\Phi\rangle = \sum_{ij} a_{ij}|\zeta_i\langle|\varphi_j\rangle$$

と書かれる．《部分内積》$\langle\zeta|\Phi\rangle$ は $\mathcal{E}_0$ のベクトルであって，

$$\langle\zeta|\Phi\rangle = \sum_{ij} a_{ij}\langle\zeta|\zeta_i\rangle|\varphi_j\rangle.$$

で与えられる．$\langle\zeta|\zeta_j\rangle$ はもちろんふつうの数である．

$$\langle X|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\langle\chi|\langle\zeta|\Phi\rangle = \langle\chi|\varphi\rangle.$$

残されているものは，対応が一対一であることの証明である．$|\Phi\rangle$ は条件 (76) と (77) にしたがうベクトルであり，$|\varphi\rangle$ は $|\Phi\rangle$ から関係 (79) によって導き出されるベクトルであるとする．性質 (77) により，$|\Phi\rangle$ は〔さきに定義した〕ベクトル $|\zeta_\alpha\rangle$ の線形結合であって，その係数は空間 $\mathcal{E}_0$ のベクトルである．すなわち

$$|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\sum_\alpha |\varphi_\alpha\rangle|\zeta_\alpha\rangle$$

と書かれる．$|\varphi\rangle$ は右辺の和のなかの $|\zeta\rangle$ の係数である．$|\Phi\rangle$ に F 型の置換を作用させると，

$$F|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\sum_\alpha (F_0|\varphi_\alpha\rangle)(F_C|\zeta_\alpha\rangle). \tag{81}$$

一方では

$$F|\Phi\rangle = (-)^f|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\sum_\alpha (-)^f|\varphi_\alpha\rangle|\zeta_\alpha\rangle. \tag{82}$$

ところで，F_C は $|\zeta_\alpha\rangle$ の型のベクトルを同じ型のベクトルに変換するが，特にベクトル $|\zeta\rangle$ を不変にする．それゆえ，$F|\Phi\rangle$ の展開のなかで $|\zeta\rangle$ の係数は，(81) の右辺における $F_C|\zeta\rangle$ の係数である．この係数を展開 (82) における $|\zeta\rangle$ の係数に等しいと置けば，

$$F_0|\varphi\rangle = (-)^f|\varphi\rangle$$

が得られる．したがってベクトル $|\Phi\rangle$ に対応するベクトル $|\varphi\rangle$ は確かに反対称性 (70) をもつ．　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　(証明終)

このようにして，Z 個の陽子と N 個の中性子の力学的状態は普通の形式ではいずれもベクトル $|\varphi\rangle$ で表わされるが，新しい形式では対応するベクトル $|\Phi\rangle$ によって表わされる．この対応は一対一で内積を保存するから，新しい形式のベクトルによって計算される確率振幅は，普通の形式から得られる振幅に等しい．このことは二つの形式が同値であることを保証する．普通の形式において，一つの力学変数がある演算子 Q で表わされるとき，新しい形式においては，空間 $\mathcal{E}_0\otimes\mathcal{E}_C$ の演算子 $\hat{Q}$ で表わされる．この演算子は $\mathcal{N}$ 個の核子に関して対称であり，Q と同じ固有値のスペクトルをもち，その固有状態は Q の固有状態から対応 (78) によって導かれる．$\hat{Q}$ は対称演算子であり，その行列要素は等式

$$\langle X|\hat{Q}|\Phi\rangle = \langle\chi|Q|\varphi\rangle \tag{83}$$

を満たす．

一例として，核子間の力は《2 核子間》の力だけであるという仮定の下に，演算子 $\hat{H}$ をつくってみよう．

そのために

$$H = K + V \tag{84}$$

と置き，K は全運動エネルギーとする．一つの陽子と一つの中性子の運動エネルギーをそれぞれ $k_p(\xi), k_n(\xi)$ で表わせば，

$$K = K_p + K_n, \qquad K_p = \sum_{i\leqslant Z} k_p^{(i)}, \qquad K_n = \sum_{i>Z} k_n^{(i)}$$

を得る(*)．V は全ポテンシャル・エネルギーであり，2 核子間相互作用の項 $\mathcal{N}(\mathcal{N}-1)/2$ 個を含む．陽子－陽子相互作用の項は $Z(Z-1)/2$ 個ある．i 番目と j 番目の陽子のあいだの相互作用ポテンシャルを $v_{pp}^{(ij)} \equiv v_{pp}(\xi^{(i)}, \xi^{(j)})$ で表わし，その和を

$$V_{pp} = \sum_{i<j\leqslant Z} v_{pp}^{(ij)}$$

とする．また，陽子–中性子相互作用の項は ZN 個ある．その和を

$$V_{pn} = \sum_{i\leqslant Z}\sum_{j>Z} v_{pn}^{(ij)}$$

とする．中性子–中性子相互作用の項は $N(N-1)/2$ 個ある．その和を

$$V_{nn} = \sum_{j>i>Z} v_{nn}^{(ij)}$$

とする．その結果全ポテンシャル・エネルギーは

$$V = V_{pp} + V_{pn} + V_{nn}$$

と書かれる．

K に対応する演算子 $\hat{K}$ は

$$\hat{K} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \left(k_p^{(i)}\, \Pi_{\varpi}^{(i)} + k_n^{(i)}\, \Pi_{\nu}^{(i)} \right) \tag{85}$$

である．実際，この演算子は対称であり，特に A と交換する．性質 (83) を確かめるには，ベクトル $|\Phi\rangle, |X\rangle$ および射影子 Π_{ϖ}, Π_{ν} の定義を思い出しさえすればよい．すなわち

$$\frac{N!\,Z!}{\mathcal{N}!}\langle X|\hat{K}|\Phi\rangle = \langle \chi\zeta|A\hat{K}A|\varphi\zeta\rangle = \langle \chi\zeta|\hat{K}A|\varphi\zeta\rangle = \langle \chi\zeta|KA|\varphi\zeta\rangle.$$

これから

$$\langle X|\hat{K}|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}!}{N!\,Z!}}\langle \chi\zeta|K|\Phi\rangle.$$

ところが演算子 K は荷電変数に作用しないから，部分内積 $\langle \zeta|K|\Phi\rangle$ は K が $\langle \zeta|\Phi\rangle$ に作用した結果に等しい．性質 (79) を使えば，

$$\langle X|\hat{K}|\Phi\rangle = \langle \chi|K|\varphi\rangle.$$

同様に，V に対応する演算子は

$$\hat{V} = \hat{V}_{pp} + \hat{V}_{pn} + \hat{V}_{nn}. \tag{86}$$

ただし

(*) ［訳注］ $k_p^{(i)} \equiv k_p(\xi^{(i)})$, $k_n^{(i)} \equiv k_n(\xi^{(i)})$.

$$\hat{V}_{pp} = \sum_{i<j\leq\mathfrak{N}} v_{pp}^{(ij)} \Pi_{\varpi}^{(i)} \Pi_{\varpi}^{(j)} \tag{86 a}$$

$$\hat{V}_{pn} = \sum_{i<j\leq\mathfrak{N}} v_{pn}^{(ij)} [\Pi_{\varpi}^{(i)} \Pi_{\nu}^{(j)} + \Pi_{\nu}^{(i)} \Pi_{\varpi}^{(j)}] \tag{86 b}$$

$$\hat{V}_{nn} = \sum_{i<j\leq\mathfrak{N}} v_{nn}^{(ij)} \Pi_{\nu}^{(i)} \Pi_{\nu}^{(j)}. \tag{86 c}$$

証明は $\hat{K}$ の場合と同じ方法でなされる．

中性子と陽子の集まりに関していま証明した性質は，２種以上のフェルミ粒子を含む系に対してもそのまま当てはまる．相似ではあるが異種のフェルミ粒子を r 組含む系を考える．すなわち，この系は１型フェルミ粒子を n_1 個，２型のものを n_2 個，…，r 型のものを n_r 個含むものとする．異なる型のフェルミ粒子を異種の粒子として取り扱う代りに，r とおりの型のフェルミ粒子はただ一つのフェルミ粒子の r 個の異なる状態 $|1\rangle$, $|2\rangle, \cdots, |r\rangle$ であると考え，上記の系はただ一つの型のフェルミ粒子を $n_1+n_2+\cdots+n_r$ 個含み，そのうち n_1 個は状態 $|1\rangle$ に，n_2 個は状態 $|2\rangle$ に，…，n_r 個は状態 $|r\rangle$ にあるものとして取り扱うこともできる．この《アイソトピック》形式と普通の形式が同値であることは，核子系の場合と同じ筋道をたどって証明される．いままで述べてきたことはボース粒子についても繰り返される．ただ反対称化演算子をいたるところで対称化演算子に置き換えればよい（問題９）．

§ 15.　荷電スピンの有用性．荷電独立性

$\mathfrak{N}$ 核子系を考える．陽子の個数 Z と中性子の個数 N の値を定めた場合だけに限定するならば，陽子と中性子を異なる粒子として取り扱う（普通の形式の）方が，異なる荷電の状態にある核子として取り扱う（荷電スピンの形式）よりもむしろ簡単であることに疑問の余地はない．

これに反して，核子系の電荷が保存されない現象においては，荷電スピンの形式がどうしても必要である．典型的な場合は β 放射能の現象である．たとえば，β^- 放射性核の崩壊において，核子の個数 $\mathfrak{N}$ は一定値を保つけれども，中性子の一つは陽子に変換される．この現象を説明するために，核を $\mathfrak{N}$ 核子系とみなし，これが電子と中性微子の量子化された場と相互作用するように取り扱う．β 放射能の理論はこの本の範囲外にあり，ここではそういうこともあるということを記すにとどめる．

このことは別にして，荷電スピンの形式がもつ主な利点は，核の相互作用が実際上核子の電荷に無関係であるという事実に由来する．

陽子と中性子の質量はたかだか 0.2 % しか違わない．したがって，各核子の運動エネル

ギーは事実上その電荷に無関係である．すなわち

$$k_p = k_n = k. \tag{87}$$

核子–核子ポテンシャルについて言えば，純粋に電磁的な相互作用が無視される限り(15)，これもまた事実上電荷に無関係である．すなわち

$$v_{pp} = v_{pn} = v_{nn} = v. \tag{88}$$

核子間の力は2核子間の力だけであるという仮定の下に(16)，荷電独立性すなわち力が電荷と無関係であることから生じる結果を調べよう．

普通の形式において，荷電独立性の仮説をハミルトニアンの性質に翻訳すれば，つぎの二つになる．

i）H は Z と N には依存せず，系の全粒子数 $\mathcal{N}$ だけに依存する．

ii）H は単に Z 個の陽子のあいだの置換および N 個の中性子のあいだの置換に関して対称であるばかりでなく，これら $\mathcal{N}$ 個の粒子の置換に関しても対称である．

実際，関係 (87) と (88) が成り立つならば，ハミルトニアン (84) は

$$H = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} k^{(i)} + \sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}} v^{(ij)} \tag{89}$$

という形をとる．ここで $\sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}}$ は (86 a, b, c) のように，$\mathcal{N}$ 個の粒子のなかから取り出される $\mathcal{N}(\mathcal{N}-1)/2$ 通りの組合せ $(i\ j)$ のすべてに対して和をとることを示す．

荷電スピンの形式論においては，荷電独立性の仮説は，ハミルトニアン $\hat{H}$ が荷電変数に無関係であるという事実に翻訳される．実際，この荷電独立性の仮説の下においては単純に

$$\hat{H} = H \tag{90}$$

が成り立つ．ただし右辺の演算子 H をここでは空間 $\mathcal{E}_0 \otimes \mathcal{E}_C$ の演算子とみなす．これを示すためには，荷電スピンの形式における演算子の定め方 (83) から出発してもよいし，あるいは，関係 (87) と (88) が成り立つという仮定の下に $\hat{K}$ と $\hat{V}$ を表わす式 (85)，(86) を直接に計算してもよい．たとえば，$\hat{V}$ については

$$\hat{V} = \sum_{i<j\leqslant\mathcal{N}} v^{(ij)} [\Pi_{\varpi}^{(i)} \Pi_{\varpi}^{(j)} + \Pi_{\varpi}^{(i)} \Pi_{\nu}^{(j)} + \Pi_{\nu}^{(j)} \Pi_{\varpi}^{(j)} + \Pi_{\nu}^{(i)} \Pi_{\nu}^{(j)}]$$

が得られ，

---

(15) 電磁効果が優勢になるのは，核子間の相互距離が十分大きい（$\gg 10^{-13}$cm）ときだけである．距離が大きいとき，v_{pn} と v_{nn} は事実上0であり，v_{pp} は2陽子間のクーロン斥力ポテンシャルに帰着する．電荷に依存しないという仮説を証拠だてる実験的事実に関する議論については，BLATT, WEISSKOPF, 前掲書(164頁脚注(33))；D. H. WILKINSON, *Phil. Mag.*, **1**, (1956), 1031 を参照．

(16) 電荷に無関係なことと不変性 (91) とが同値であることを証明するために，力の性質についてこのような制限をつけることは必要でない．これは一般の場合にも，付録D，§18の定理を使って証明できる．

$$\Pi_w^{(i)}+\Pi_v^{(i)}=1$$

であるから

$$\hat{V}=\sum_{i<j\leqslant\mathfrak{N}} v^{(ij)}=V.$$

$\hat{H}$ は荷電変数と無関係であるから，全荷電スピンの三つの成分と交換する．すなわち

$$[\hat{H}, T]=0. \tag{91}$$

逆に，$\hat{H}$ が交換関係 (91) を満たすならば，これを荷電変数に無関係な演算子に書き表わすことができる．

実際，$\hat{H}$ はすべての粒子に関する普通の変数 ξ と荷電変数 $\boldsymbol{\tau}$ のある関数である．力の性質に関するわれわれの仮定により，この関数は

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{\mathfrak{N}}\hat{k}^{(i)}+\sum_{i<j\leqslant\mathfrak{N}}\hat{v}^{(ij)}$$

という形をしている．ただし $\hat{k}^{(i)}$ は変数 i だけに依存し，$\hat{v}^{(ij)}$ は変数 i, j だけに依存する．しかし，荷電スピンは通常のスピンと同じ数学的性質をもつ．特に，ベクトル $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$ の成分はパウリ行列の性質をすべてもつ．したがって（第13章，(78)～(79) を参照），ベクトル $\boldsymbol{\tau}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{\tau}^{(\mathfrak{N})}$ の成分を含む任意の関数 $\hat{H}$ はつねにこれらの演算子の関数として線形に表わされる．他方，$\hat{H}$ は $\boldsymbol{T}$ と交換するから，空間 $\mathcal{E}_C$ の回転に関して不変な演算子である．すなわち $\hat{H}$ はベクトル $\boldsymbol{\tau}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{\tau}^{(\mathfrak{N})}$ のスカラー関数である．その結果，$\hat{k}^{(i)}$ は $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$ の線形スカラー関数となり，したがって $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$ に無関係である．$\hat{v}^{(ij)}$ は $\boldsymbol{\tau}^{(i)}$ と $\boldsymbol{\tau}^{(j)}$ の線形スカラー関数となり，したがって必ず

$$\hat{v}^{(ij)}=a^{(ij)}+(\boldsymbol{\tau}^{(i)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(j)})\,b^{(ij)}$$

の形をとる．ただし，$a^{(ij)}$ と $b^{(ij)}$ は軌道変数とスピン変数だけの関数である．求める性質を証明するには，空間 $\mathcal{E}_0\otimes\mathcal{E}_C$ の反対称ベクトルに対する $(\boldsymbol{\tau}^{(i)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(j)})$ の作用が，空間 $\mathcal{E}_0$ の変数だけに関する演算子の作用と同じであることを示せばよいわけである．ところで，$(\boldsymbol{\tau}^{(i)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(j)})$ はディラックの恒等式

$$P_C^{(ij)}=\frac{1}{2}\{1+(\boldsymbol{\tau}^{(i)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(j)})\} \tag{92}$$

により，荷電空間の互換 $(i\,j)$ を表わす演算子 $P_C^{(ij)}$ と結びつけられる．

恒等式 (92) を証明するため，組 $(i\,j)$ の荷電スピン

$$\boldsymbol{t}_{ij}=\boldsymbol{t}^{(i)}+\boldsymbol{t}^{(j)}$$

を導入する．荷電空間の状態はいずれも，$t_{ij}=1$ に対応する状態 $|1\rangle$ と $t_{ij}=0$ に対応する状態 $|0\rangle$ との和である．さて，3重項状態はすべて i, j につき対称であり，1重項状態は i, j につき反対称であるから，

$$\boldsymbol{t}_{ij}^2|1\rangle=2|1\rangle,\qquad \boldsymbol{t}_{ij}^2|0\rangle=0,$$
$$P_C^{(ij)}|1\rangle=|1\rangle,\qquad P_C^{(ij)}|0\rangle=-|0\rangle,$$

したがって

$$P_C^{(ij)} = t_{ij}^2 - 1.$$

この式に等式

$$t_{ij}^2 = \frac{1}{2}\{3 + (\boldsymbol{\tau}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\tau}^{(j)})\}$$

を適用すれば (92) が導き出される．したがって

$$(\boldsymbol{\tau}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\tau}^{(j)}) = 2P_C^{(ij)} - 1.$$

しかしながら，$\mathcal{E}_0 \otimes \mathcal{E}_C$ の反対称ベクトルがつくる空間では，

$$P^{(ij)} \equiv P_C^{(ij)} P_0^{(ij)} = -1,$$

したがって

$$P_C^{(ij)} = -P_0^{(ij)}$$

となり，演算子 $(\boldsymbol{\tau}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\tau}^{(j)})$ は演算子

$$-2P_0^{(ij)} - 1$$

に置き換えられる．この演算子は空間 $\mathcal{E}_0$ の変数にしか関係しない． (証明終)

荷電独立性と荷電空間における回転による不変性とが同値であることはまったく一般的な事実である[17]．回転に関して数学的に展開された結果は，荷電空間の回転という特殊な場合にもすべてそのまま成り立つ（荷電スピンの合成，ウィグナー＝エッカルトの定理，選択規則，など）．それゆえ，核力の荷電独立性を考慮に入れるとき特に便利な方法が，この同値法則によって与えられる．

演習と問題

1. N 個の相似粒子から成る系がある．N 個の粒子の置換 p に伴う演算子 P を§2で定義したときは，与えられた対称表現 $\{Q\}$ の基底ベクトルに対する作用から定めた．この定義がどの表現を選んだかによらないことを示せ．

2. 粒子 $1, 2, \cdots, n$ の対称化演算子と反対称化演算子を S_n, A_n とし，粒子 $1, 2, \cdots, n-1$ の対称化演算子と反対称化演算子を S_{n-1}, A_{n-1} とする．つぎのことを示せ：

$$S_n = \frac{1}{n}\left[1 + \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right] S_{n-1} = \frac{1}{n} S_{n-1}\left[1 + \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right]$$

$$A_n = \frac{1}{n}\left[1 - \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right] A_{n-1} = \frac{1}{n} A_{n-1}\left[1 - \sum_{i=1}^{n-1} P_{(in)}\right].$$

3. 相似 N 粒子系の対称なオブザーバブルのうちには，$N=2$ の場合を除けば，交換するオブザーバブルの完全集合が存在しないことを示せ．

4. 陽子–陽子散乱において，入射陽子は与えられた方向 Ou に完全な偏りをもつ（Ou

---

(17) 注(16) を参照．

方向のスピン成分が $+1/2$ に等しい）とする．つぎの場合について（重心系における）断面積の式を求めよ．

i）標的陽子が同じ方向に完全な偏りをもつとき；

ii）反対方向に完全な偏りをもつ（Ou 方向のスピン成分が $-1/2$ に等しい）とき；

iii）偏りがないとき．

これら三つの場合に得られた式と (56) を比較せよ．

5. (56) によって与えられた散乱断面積は，相互作用がスピンに無関係なスピン $1/2$ の二つのフェルミ粒子に関するものである．二つの同種粒子が

a）スピン j のフェルミ粒子であるとき，

b）スピン j のボース粒子であるとき，

(56) をどのように修正する必要があるか．

6. トーマス=フェルミの原子模型において，原点から各電子までの距離の平均値 $\langle r\rangle$ を計算し，水素原子における $\langle r\rangle$ の数値と比較せよ（積分 $\int_0^\infty \chi(x)\,\mathrm{d}x \simeq 1.8$ が用いられる）．

7. 原子番号 Z の1原子が p 重にイオン化されている．トーマス=フェルミ模型を用いて電子密度 $\rho(r)$ を計算せよ．b と x については §13（式 (64)—(65)）と同じ定義をとるとき，$\rho(r)$ の式 (66) はつねに成り立つ．また，この式に現われる関数 $\chi(x)$ は方程式 (67) の解で，区間 $(0,\infty)$ の一点 x_0 において0となり，条件

$$\chi(0)=1,\qquad \chi'(x_0)=-p/Zx_0$$

を満たす．以上のことを示せ．曲線 $\rho(r)$ と静電ポテンシャル $\Phi(r)$ の概形を調べよ．

8. ハミルトニアンがスピンに無関係な Z 電子系を考える．全スピンの成分 S_z が一定値 M となるような状態のエネルギー・スペクトルは，スピン $1/2$ の電子とスピン $-1/2$ の電子を異種のフェルミ粒子として取り扱い，初めの $(Z/2+M)$ 個の電子がスピン $1/2$ を，残りがスピン $-1/2$ をもつ状態に対して得られるスペクトルと同じである（位置も準位の縮退も同じである）．このことを示せ．

9. 相似ではあるが互いに異なる r 種類の型に分類される $\mathcal{N}$ 個のフェルミ粒子，すなわち1型のフェルミ粒子 n_1 個，2型のフェルミ粒子 n_2 個，…，r 型のフェルミ粒子 n_r 個 $(n_1+n_2+\cdots+n_r=\mathcal{N})$ から成る系を考え，これに対して §14 に定めた《アイソトピック》形式論をつくれ．$\mathcal{N}$ 個の粒子がフェルミ粒子でなく，ボース粒子であるとき，この形式はどのように修正する必要があるか．

第15章(*) 不変量と保存法則. 時間反転

§1. 序　　説

この章は，一つの物理系の変化の法則がいくつかの変換に関してもちうる不変量の性質と，系の挙動についてこれから導き出される結果の系統的な研究に当てられる.

いくつかの数学的な補足説明が第I節で与えられる.

第II節では，変換と変換群の一般的性質を調べる. 力学変数と力学的状態の変換 $\mathscr{T}$ の一つ一つに，状態を表わすケットベクトルの変換演算子 T が一つずつ結びつけられる. T は必ず線形ユニタリであるか，または反線形ユニタリであり，系の基本オブザーバブルの変換法則によって，任意の位相因数を除いて定められる. 実際には，時間反転の場合を除いて T はつねに線形である. 物理学において出会ういろいろな変換によって，いくつかの変換群をつくり，こうしてつくられた群 $\mathscr{G}$ の一つ一つに，ある変換演算子群 G を結びつけることができる(1). 最もよく使われる数種の群の吟味を終えてから，いくつかの簡単な例について群 G の構成法を示す. この際，$\mathscr{G}$ が有限群である場合と，$\mathscr{G}$ が連続群であって，その有限な変換がいずれも無限小変換の継続によって定められる場合とを取り扱う.

本来の意味の不変量の問題には第III節で手をつける. この節で考える変換は時間を含まない線形変換である. 結果はすでに回転の場合（第13章）に得られたものの簡単な一般化である. 群 $\mathscr{G}$ の変換に関して力学的状態の変化が不変であるという要請は，ハミルトニアン H が群 G のすべての演算子と交換するという仮定と同値である. したがって，G の演算子からつくられるオブザーバブルはいずれも運動の定数である. すなわち，《$\mathscr{G}$》不変量にはいくつかの保存法則が対応する. このような H の対称性によって，H の対角化を簡明にし，その固有値の縮退の位数をある程度まで予見することができる.

時間反転による不変量は，その物理的意味からみても，時間反転演算子が反線形であるという事実からみても，他の型の不変量とは違っている. 第IV節は実質上これに当てられ

(*) 第4部（第16章—第19章）は，特に示したいくつかの部分を除けば，本章と関係がなく，本章よりさきに読み始めることができる. その際本章と関係のある部分を一回目にはとばして読んでよろしい.

(1) 本章で用いられる群とその表現に関するいくつかの概念は付録Dの第I節と第II節で与えられる.

る．

本章を通じて，古典力学と量子力学とのあいだにある驚くべき類似は注目されよう．それは変換の定義そのものにおいても，変化の法則の不変性とハミルトニアンの対称性とのあいだにある結びつきにおいても，保存法則の存在においても見られる．

I．数学的補足説明．反線形演算子

§ 2.　有用な三つの定理

定理 I.　二つの線形演算子 A, B が等しいためには，

$$\text{任意の } |u\rangle \text{ に対して}\qquad \langle u|A|u\rangle = \langle u|B|u\rangle$$

となることが必要十分である．

定理 II.　二つの線形演算子 A, B が位相を除いて等しい，すなわち

$$A = B\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \tag{1}$$

であるためには，

$$\text{任意の } |u\rangle \text{ と } |v\rangle \text{ に対して}\qquad |\langle u|A|v\rangle| = |\langle u|B|v\rangle| \tag{2}$$

となることが必要十分である．

定理 III.　空間 $\mathcal{E}$ のベクトルのあいだに任意の位相を除いて定められた一対一の対応 $\mathcal{T}$ があり，この対応によって内積の絶対値が保存されるならば，適当な位相を定めてこの対応を線形ユニタリまたは反線形ユニタリにすることができる．

定理 I はすでに第 7 章（§ 5）で述べたものである．ここでは念のためにあげておく．

定理 II に関しては，等式（1）から性質（2）が出ることは明らかである．逆を証明するために，一つの表現を定め，この表現における A, B の行列要素をそれぞれ A_{ij}, B_{ij} とする．この表現の基底ベクトルに対しても性質（2）が成り立つから，

$$\text{任意の } i \text{ と } j \text{ に対して}\qquad |A_{ij}| = |B_{ij}| \tag{3}$$

となる．

$|u\rangle$ として i 番目の基底ベクトルをとり，$|v\rangle$ として j 番目と k 番目の基底ベクトルの任意の線形結合をとれば，同様にして

$$|A_{ij}x_j + A_{ik}x_k| = |B_{ij}x_j + B_{ik}x_k|$$

が得られる．ただし x_j と x_k は任意の複素係数である．（3）を考えに入れると，この性質はまた

$$\mathrm{Re}\,[x_j x_k^*(A_{ij}A_{ik}^* - B_{ij}B_{ik}^*)] = 0$$

と書かれる．これが任意の $x_j x_k^*$ に対して成り立つためには，

$$A_{ij}A_{ik}^* - B_{ij}B_{ik}^* = 0$$

でなければならない．性質（3）と結びつけると，

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} = \frac{A_{ik}}{B_{ik}} \tag{4}$$

を得る．

与えられた i の値に対して，列の添字 j と k をいろいろ選んで同じ議論を繰り返すことができる．したがって，比 A_{ij}/B_{ij} は j に無関係である．行と列の役割を入れ替えて同じ証明をもう一度することができるから，この比はまた i にも無関係である．さらに，(3) により A と B の行列要素は同じ絶対値をもつから，この比は絶対値 1 の数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ である．すなわち，

$$\text{任意の } i \text{ と } j \text{ に対して} \qquad \frac{A_{ij}}{B_{ij}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}.$$

言いかえれば，演算子 A と B は位相因数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ を除いて等しい． (証明終)

定理IIIはつぎのようにして証明される．仮定により，規則 $\mathscr{T}$ にしたがって空間 $\mathcal{E}$ の各ベクトル $|u\rangle$ にあるベクトル $|u'\rangle$ が対応する．このベクトルは位相因数を除いて明確に与えられるから，差し当たっては位相を任意に固定しておく．位相を決めてしまえば，規則 $\mathscr{T}$ によって $\mathcal{E}$ のベクトル間に一対一の対応がつけられる．すなわち

$$|u'\rangle = \mathscr{T}[|u\rangle], \qquad |u\rangle = \mathscr{T}^{-1}[|u'\rangle]. \tag{I}$$

また，この対応は内積の絶対値を保存する．すなわち

$$|\langle u'|v'\rangle| = |\langle u|v\rangle|. \tag{II}$$

そこで

$$|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |n\rangle, \cdots \tag{5}$$

を $\mathcal{E}$ のベクトルから成る完全直交規格化列とする．対応するベクトル

$$|1'\rangle, |2'\rangle, \cdots, |n'\rangle, \cdots \tag{5'}$$

もまた完全直交規格化列をつくる．実際，(II) によって規則 $\mathscr{T}$ はノルムと直交性を保つから，(5′) は直交規格化列である．また，(5′) のベクトル全部と直交するベクトル $|a'\rangle$〔$\neq 0$〕が存在すると仮定すれば，ベクトル $|a\rangle \equiv \mathscr{T}^{-1}[|a'\rangle]$〔$\neq 0$〕は (5) のベクトル全部と直交することになり，仮定と矛盾する．したがって (5′) は完全である．

表現 $\{|n\rangle\}$ における $|u\rangle$ の成分と表現 $\{|n'\rangle\}$ における $|u'\rangle$ の成分をくらべてみる．

$$u_n \equiv \langle n|u\rangle = |u_n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\tau_n}, \qquad u'_n = \langle n'|u'\rangle = |u'_n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\tau'_n} \tag{6}$$

と置く．u'_n はいずれも $u_1, u_2, \cdots, u_n, \cdots$ の関数としてはっきり決まっている．これらの関数に対して，性質 (II) はきわめて強い制限条件を課する．$|v\rangle = |n\rangle$ と置けば，

$$|u'_n| = |u_n| \tag{7}$$

が得られる．$|v\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}|j\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}|k\rangle$ と置けば，

$$|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha'}u'_j + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta'}u'_k| = |\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}u_j + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta}u_k|$$

を得る(*)．性質 (7) を考慮すれば，これは

(*) [訳注] $v_n \equiv \langle n|v\rangle$, $v'_n \equiv \langle n'|v'\rangle$ と置けば，$|v_j| = |v_k| = 1$, $v_n = 0$ $(n \neq j, k)$．(7) を v_n, v'_n に適用して，$|v'_j| = |v'_k| = 1$, $v'_n = 0$ $(n \neq j, k)$．したがって $|v\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha'}|j'\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta'}|k'\rangle$ と書かれる．位相 α', β' は $(j, k; \alpha, \beta)$ によって定↗

$$\cos(\tau'_j-\tau'_k-\alpha'+\beta')=\cos(\tau_j-\tau_k-\alpha+\beta)$$

に同値である. したがって, 偏角 $\tau'_j-\tau'_k-\alpha'+\beta'$ と $\tau_j-\tau_k-\alpha+\beta$ は, 等しいかまたは反対符号をもつ ($2n\pi$ の差は考えない). 言いかえれば, つぎの a), b) のうちどちらかが起こる:

a) $\tau'_j-\tau'_k=\tau_j-\tau_k+d_{jk}$, 　　(8 a)

ただし $d_{jk}\equiv(\alpha'-\alpha)-(\beta'-\beta)$ は成分 $u_1, u_2, \cdots, u_n, \cdots$ に無関係な定数である(*).

b) $\tau'_j-\tau'_k=-(\tau_j-\tau_k)+s_{jk}$, 　　(8 b)

ただし $s_{jk}\equiv(\alpha'+\alpha)-(\beta'+\beta)$ もまた u_n に無関係な定数である.

それゆえ, 組 (jk) の一つ一つに対して, 二つの関係式 (8 a), (8 b) のうちのどちらか一つが得られる. しかし実際は, 組 (jk) がすべて (8 a) を満たすか, またはすべて (8 b) を満たす. たとえば特定の三組 (jk), (kl), (lj) をとり, 具体的に考えるため, 初めの二つが関係 (8 a) を満たすとしよう. このとき

$$\begin{aligned}\tau'_l-\tau'_j&=(\tau'_l-\tau'_k)+(\tau'_k-\tau'_j)=(\tau_l-\tau_k)+(\tau_k-\tau_j)+d_{lk}+d_{kj}\\&=\tau_l-\tau_j+d_{lk}+d_{kj}\end{aligned}$$

となるから(**), (lj) もまた必ず (8 a) を満たす.

したがって, 起こりうる場合はつぎの二つに限る:

場合 a)　すべての差 $\tau'_j-\tau'_k$ が (8 a) を満たす. 一つのベクトル

$$|a\rangle=\sum_n a_n|n\rangle$$

をとり,

$$|a'\rangle=\sum_n a_n|n'\rangle$$

が成り立つように, 基底ベクトル $|1'\rangle, |2'\rangle, \cdots, |n'\rangle, \cdots$ およびベクトル $|a'\rangle$ の位相を固定する. このように特殊な位相を選ぶと, d_{jk} はすべて必ず0になり, どんな j, k に対しても $\tau'_j-\tau'_k=\tau_j-\tau_k$ となる. (7) を考慮すれば, 任意のベクトル $|u\rangle$ に対して, 比 u'_n/u_n は n に無関係な位相因数であることがわかる. この因数が1に等しくなるように $|u'\rangle$ の位相を固定することはいつでもできる. こうしてすべての位相を固定してしまえば,

$$\text{任意の } n \text{ に対して}\qquad u'_n=u_n$$

が成り立つ. どのベクトル

$$|u\rangle=\sum_n u_n|n\rangle$$

↘ まることに注意する. なお, 以下の議論を見ると, α, β を一般にとる必要はなく, $|v\rangle=|j\rangle+|k\rangle$, すなわち $\alpha=\beta=0$ の場合を考えれば十分である. このとき, α', β' は (j, k) の関数として決まる.

(*) [訳注]　$\alpha=\beta=0$ とすれば, $d_{jk}=\alpha'-\beta'$. これから $d_{kj}=-d_{jk}$, $d_{jk}+d_{kl}=d_{jl}$ が得られる.

つぎの s_{jk} も $\alpha'-\beta'$ に等しい.

(**) [訳注]　(*) を見よ.

にも，ベクトル

$$|u'\rangle=\sum_n u_n|n'\rangle$$

が対応する．したがって対応 $\mathcal{T}$ は線形であり，

$$\langle u'|v'\rangle=\langle u|v\rangle \tag{9a}$$

が成り立つ，すなわち線形ユニタリ対応である．

<u>場合 b)</u>　すべての差 $\tau'_j-\tau'_k$ が（8b）を満たす．一つのベクトル

$$|a\rangle=\sum_n a_n|n\rangle$$

をとり，

$$|a'\rangle=\sum_n a_n^*|n'\rangle$$

が成り立つように，基底ベクトル $|1'\rangle, |2'\rangle, \cdots, |n'\rangle, \cdots$ およびベクトル $|a'\rangle$ の位相を固定する．このように位相を選ぶと，s_{jk} はすべて必ず0になり，どんな j, k に対しても $\tau'_j-\tau'_k=-(\tau_j-\tau_k)$ となる．（7）を考慮すれば，任意のベクトル $|u\rangle$ に対して，比 u'_n/u^*_n は n に無関係な位相因数であることがわかる．この因数が1に等しくなるように $|u'\rangle$ の位相を固定することはいつでもできる．こうしてすべての位相を固定してしまえば，

$$\text{任意の } n \text{ に対して}\qquad u'_n=u^*_n$$

が成り立つ．この場合，対応 $\mathcal{T}$ は<u>反線形</u>であり，

$$\langle u'|v'\rangle=\langle u|v\rangle^* \tag{9b}$$

となる．反線形演算子に関するユニタリ性の定義はのちに与えられる．それによれば，この対応は反線形ユニタリ対応である．　（証明終）

§3.　ヒルベルト空間の反線形演算子

ヒルベルト空間における反線形演算子は，線形演算子と非常によく似た性質をもつ．線形演算子について第7章で説明したときと同じ筋道をたどって，これらの要点を説明する．

定義．ケットに対する作用

ヒルベルト空間の各ケットベクトル $|u\rangle$ に対応して，この空間のあるケットベクトル $|v\rangle$ が定まり，この対応が反線形であるとき，ある反線形演算子 A が $|u\rangle$ に作用した結果として $|v\rangle$ が生じると言い，

$$|v\rangle=A|u\rangle \tag{10}$$

と書く．反線形性は

$$A(\lambda_1|1\rangle+\lambda_2|2\rangle)=\lambda_1^*(A|1\rangle)+\lambda_2^*(A|2\rangle) \tag{11}$$

と書き表わされる．

線形独立な $\mathcal{E}$ のベクトルから成る完全列の各ベクトルに対する反線形演算子の作用，特

に $\mathcal{E}$ の基底系の各ベクトルに対する作用によって，この演算子は完全に定められる．

代数演算

線形演算のときと同じように定義する．

1)　定数 c を掛けること．$c \neq c^*$ のとき $cA \neq Ac$ に注意する．正しくは

$$\boxed{cA = Ac^*} \tag{12}$$

2)　二つの反線形演算子の和（念のためあげる）．

3)　積：A_1, A_2 が反線形であるとき，

$$(A_1A_2)|u\rangle = A_1(A_2|u\rangle)$$

で定義される積 A_1A_2 は線形演算子である．A が反線形で B が線形のとき，積 AB は反線形である．もっと一般に，$p+q$ 個の演算子から成る列 $A, B, \cdots, L$ のうち，p 個が線形で q 個が反線形であるとき，q が偶数であるか奇数であるかによって，積 $(AB\cdots L)$ は線形あるいは反線形である．

これらの積はすべて結合法則を満たすが，一般には交換法則を満たさない．交換子の定義は線形演算子の場合と同じであって，その代数法則（第5章(63)－(66)）もそのまま成り立つ．

逆

(10) によって定められた $|u\rangle, |v\rangle$ 間の対応が一対一であるとき，これによって A の逆演算子 A^{-1} も定められる．すなわち

$$|u\rangle = A^{-1}|v\rangle.$$

反線形演算子 A, B に対して，

$$AB = 1, \qquad BA = 1 \tag{13}$$

が同時に成り立つとき，A, B は互いに逆であると定義する．

演算子 $A, B, C, \cdots, L$ が線形または反線形であって，いずれも逆をもつとき，これらの積の逆も存在して，つぎの式が成り立つ．

$$(ABC\cdots L)^{-1} = L^{-1}\cdots C^{-1}B^{-1}A^{-1}. \tag{14}$$

ブラに対する作用

A は反線形演算子，$\langle\chi|$ はブラベクトルであるとする．内積 $\langle\chi|(A|u\rangle)$ の共役複素数を $|u\rangle$ の関数とみなせば，一つのブラが定められる（第7章，§3を参照）．これを $\langle\eta|$ で表わす．ここで

$$\langle\eta| = \langle\chi|A \tag{15}$$

と定義する．$\langle\chi|$ から $\langle\eta|$ への対応は反線形である．すなわち

$$(\lambda_1\langle 1| + \lambda_2\langle 2|)A = \lambda_1^*(\langle 1|A) + \lambda_2^*(\langle 2|A). \tag{16}$$

この定義により，内積のあいだに等式

$$\boxed{(\langle\chi|A)|u\rangle = [\langle\chi|(A|u\rangle)]^*} \tag{17}$$

が成り立つ．この式を線形演算子に関する第7章の等式（17）とくらべるがよい．今の場合には，括弧を省略することができない．

ブラに作用する演算子について三つの代数演算と逆とを定義するには，線形演算子の場合と同じ道をたどればよい．定数 c を掛けるときは

$$\langle\chi|(cA) = c^*(\langle\chi|A) = \langle\chi|(Ac^*) \tag{18}$$

となる（(12) を参照）．その他は変わらない．

重要な注意

関係式（12）と（17）によって，普通の計算と反対称演算子を含む計算との違いが要約されている．すなわち，

i）ケット空間あるいはブラ空間の演算子とみなすとき，与えられた定数 c は実数でない限り反線形演算子と交換しない．

ii）内積を表わす式においては，A がその右にあるケットに作用するのか，あるいは左にあるブラに作用するのかを明確に指示することが必要である．

実際には，使っている記号の意味について起こりうる混乱をすっかり避けるために必要なだけ括弧を利用する．たとえば二つの反線形演算子の積 A_1A_2 を考える．このとき記号 $\langle u|A_1A_2|v\rangle$ は混乱を招く．これに反して，$\langle u|(A_1A_2)|v\rangle$ とすれば混乱を招かない：

$$\langle u|(A_1A_2)|v\rangle = (\langle u|A_1A_2)|v\rangle = [(\langle u|A_1)(A_2|v\rangle)]^* = \langle u|(A_1A_2|v\rangle) \tag{19}$$

が成り立つからである．また，反線形演算子 A と線形演算子 $|u\rangle\langle v|$ の積 $A(|u\rangle\langle v|)$ を考える．記号 $A|u\rangle\langle v|w\rangle$ と $\langle w|A|u\rangle\langle v|$ は混乱を招く．しかし $A(|u\rangle\langle v|)|w\rangle$ と $\langle w|A(|u\rangle\langle v|)$ は混乱を招かない．なぜなら

$$(A(|u\rangle\langle v|))|w\rangle = A(|u\rangle\langle v|w\rangle) = (A|u\rangle)\langle v|w\rangle^* \tag{20}$$

および

$$\langle w|(A(|u\rangle\langle v|)) = (\langle w|A)|u\rangle\langle v| = [\langle w|(A|u\rangle)]^*\langle v| \tag{21}$$

が成り立つからである．

§4.　反線形変換

随伴反線形演算子（あるいはエルミート共役反線形演算子）

$A^\dagger$ が反線形演算子 A の随伴演算子であるというのは，任意の $|u\rangle$ に対して $A^\dagger|u\rangle$ が $\langle u|A$ の共役ケットになるときであると定義する．これは反対称演算子である．

したがって，どのような $|u\rangle$ と $|t\rangle$ についても，

$$\langle t|\,(A^{\dagger}|u\rangle) \equiv \langle u|\,(A|t\rangle) \tag{22}$$

が成り立つ．この等式を第7章の等式 (20) と比較するがよい．このことを別にすれば，第7章の§7にあげた性質はすべてそのまま成り立つ．特に：

演算子 $A, B, C, \cdots, L$ が線形であっても反線形であっても，

$$(ABC\cdots L)^{\dagger} = L^{\dagger}\cdots C^{\dagger}B^{\dagger}A^{\dagger} \tag{23}$$

が成り立つ（(14) を参照）．

反ユニタリ演算子

A が反線形で，逆が A のエルミート共役に等しいとき，すなわち

$$AA^{\dagger} = A^{\dagger}A = 1$$

であるとき，A は反ユニタリであるという．

全部で $p+q$ 個の演算子から成る列 $A, B, C, \cdots, L$ のうち，p 個がユニタリ，q 個が反ユニタリならば，q が偶数であるか奇数であるかによって，積 $ABC\cdots L$ はユニタリまたは反ユニタリである．

線形演算子とベクトルに対する反ユニタリ変換

反ユニタリ演算子 K により，$\mathcal{E}$ の線形演算子とベクトルに対して一つの反ユニタリ変換が定められる．この変換によって，

任意のケット $|u\rangle$ は，$|\hat{u}\rangle \equiv K|u\rangle$ に

任意の線形演算子 B は，$\hat{B} \equiv KBK^{\dagger}$ に

任意のブラ $\langle v|$ は，$\langle\hat{v}| \equiv \langle v|K^{\dagger}$ に

変換される．

このような変換において，

i）　ブラとケットのあいだの共役関係および演算子間のエルミート共役関係は保存される．B がオブザーバブルならば，$\hat{B}$ も同じ固有値スペクトルをもつオブザーバブルであって，B の各固有値の部分空間は $\hat{B}$ の同じ固有値の部分空間に変換される．

ii）　内積はその共役複素数

$$\langle\hat{u}|\hat{B}|\hat{v}\rangle = \langle u|B|v\rangle^{*} \tag{24}$$

に変換される．

iii）　任意の定数 c を演算子とみなせば，c はその共役複素数

$$KcK^{\dagger} = c^{*} \tag{25}$$

に変換される．

iv）　ベクトルおよび演算子のあいだに一つの〔代数的〕関係が存在するとき，それらを

変換したものは，初めの関係から各係数をその共役複素数に置き換えて導かれる関係を満たす．言いかえると，ベクトルおよび演算子間の等式は，そこに現われる係数を演算子として取り扱うことにすれば，変換 K によって保存される．たとえば，交換関係

$$[q, p] = \mathrm{i}\hbar, \qquad [J_x, J_y] = \mathrm{i}\hbar J_z \tag{26 a}$$

はそれぞれ

$$[\hat{q}, \hat{p}] = -\mathrm{i}\hbar, \qquad [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = -\mathrm{i}\hbar \hat{J}_z \tag{26 b}$$

に変換される．

§ 5. 反線形演算子と表現

表現 $\{Q\}$ に結びついた複素共役演算子 K_Q

表現 $\{Q\}$ における波動関数をその複素共役に変換する演算子を K_Q と定義する．本質的に，この演算子は選ばれた表現，特に基底ベクトルの位相によって変わる．

$|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |n\rangle, \cdots$ を $\{Q\}$ の基底ベクトル列とする．K_Q は反線形演算子で，これらのベクトルを変えない．すなわち

$$K_Q|n\rangle = |n\rangle. \tag{27}$$

このことによって K_Q は曖昧さを残さず定められる．実際，明らかに

$$K_Q^\dagger = K_Q, \qquad K_Q^2 = 1 \tag{28}$$

であり，したがって K_Q は反ユニタリ演算子である．またこれは初めに述べた性質をもつ．すなわち，

反ユニタリ変換 K_Q によって，表現 $\{Q\}$ の行列はその複素共役に変換される．事実，

$$\langle n|(K_Q|u\rangle) = \langle n|u\rangle^*, \qquad (\langle v|K_Q)|n\rangle = \langle v|n\rangle^*,$$

$$\langle m|(K_Q B K_Q)|n\rangle = \langle m|B|n\rangle^* \qquad (B \text{ は線形演算子})$$

が成り立つ．

それゆえ表現 $\{Q\}$ における K_Q の作用は，単なる複素共役の演算によって表わされる．任意の反線形演算子 A は一つの線形演算子と K_Q との積であることに注意すれば，A の表現が容易に導き出される．実際，

$$A = (AK_Q)K_Q = K_Q(K_Q A)$$

であり，(AK_Q) と $(K_Q A)$ は線形演算子である．そしてこれら二つは変換 K_Q によって互いに導かれる．すなわち

$$K_Q A = K_Q(AK_Q)K_Q$$

（A が反ユニタリならば，$(K_Q A)$ と (AK_Q) はユニタリである）．

表現の変更

もう一つの表現 $\{\Xi\}$ を考える．この表現に結びついた複素共役演算子を K_Ξ で表わし，その他のものについては第7章，§21 の記号を使う．特に，線形演算子とベクトルの変換を表わす行列はユニタリ行列 $S(\xi\,;n)\equiv\langle\xi|n\rangle$ である．

この行列が実ならば，新しい基底ベクトルは演算 K_Q によって不変である．言いかえれば，

$$S=S^* \text{ のとき}, \quad K_\Xi=K_Q. \tag{29}$$

この場合，表現 $\{\Xi\}$ において，与えられた反線形演算子 A に伴う線形演算子 AK_Ξ と $K_\Xi A$ は，表現 $\{Q\}$ において A に伴うものと同じである．

この条件が満たされないとき，AK_Ξ は AK_Q と異なる．しかし，表現 $\{\Xi\}$ においてこの演算子を表わす行列 $(AK_\Xi)_\Xi$ を，表現 $\{Q\}$ において AK_Q を表わす行列 $(AK_Q)_Q$ から導くことができれば有益である．そこで

$$\begin{aligned}\langle\xi|(AK_\Xi)|\xi'\rangle &= \langle\xi|(AK_Q)(K_QK_\Xi)|\xi'\rangle\\ &=\sum_{mn}\langle\xi|m\rangle\langle m|(AK_Q)|n\rangle\langle n|(K_QK_\Xi)|\xi'\rangle\\ &=\sum_{mn}\langle\xi|m\rangle\langle m|(AK_Q)|n\rangle\langle n|\xi'\rangle^*\end{aligned}$$

すなわち

$$(AK_\Xi)_\Xi=S(AK_Q)_Q\tilde{S}. \tag{30}$$

同様にして

$$(K_\Xi A)_\Xi=(AK_\Xi)^*_\Xi=S^*(K_QA)_QS^\dagger. \tag{31}$$

II．変換と変換群

§ 6.　一つの系の力学変数と力学的状態の変換

われわれはすでに，物理系の回転と物理系の粒子の置換とは何であるかを定義した．

もっと一般に，ある物理系に一つの変換 $\mathcal{T}$ を施すということは，この系の物理的性質を完全に保ちながら，その変数をすべて新しい変数に，その力学的状態をすべて新しい力学的状態に置き換えることである．

たとえば，変換 $\mathcal{T}$ によって力学変数のあいだに一対一の対応がつけられるとする．与えられた一つの変数 B はこの系の別の変数

$$B'\equiv\mathcal{T}[B]$$

に変換される．仮定により，変換された B' は B と同じスペクトルをもち，B' の各固有値の固有状態は，B の同じ固有値の固有状態から変換されたものである．この二つの条件によって，力学変数の変換における物理的性質の保存が表わされる．この保存条件を定

式化するのに，測定の方法を引きあいに出す必要はなかったけれども，変換 $\mathscr{T}$ を変数 B に結びついた測定装置に施される変換のように想像することはきわめてやさしい．この装置が変換を受けると，変数 B' に結びついた測定装置になる．このようにして力学変数の移動（回転，並進（平行移動）），力学変数の反転（点，平面に関する対称移動）などが定義される．

変数の変換という概念から状態の変換という概念に移るのは容易である．この系のとりうる状態を表わすベクトルを $|u\rangle$ とする．これはいつでも，交換するオブザーバブルの完全集合に共通な固有状態と考えられる．こう考えると，$|u\rangle$ は位相を除いて定められる．その変換

$$|u'\rangle \equiv \mathscr{T}[|u\rangle]$$

は，変換された各オブザーバブルに共通な固有状態である．それゆえ，位相を別にすれば，$\mathscr{T}$ によって状態ベクトル間に一対一の対応がつけられる．

仮定により，この変換は力学的状態の物理的性質を保存する．すなわち，系が状態 $|u'\rangle$ にあるとき，$|v\rangle$ から変換された状態 $|v'\rangle$ に相当する測定結果を得る確率は，系が状態 $|u\rangle$ にあるとき状態 $|v\rangle$ に相当する測定結果を得る確率に等しい．言いかえれば，

$$\text{任意の } |u\rangle \text{ と } |v\rangle \text{ に対して} \qquad |\langle u'|v'\rangle|^2 = |\langle u|v\rangle|^2.$$

したがって問題の一対一対応は内積の絶対値を保存する．定理IIIにより，変換されたベクトルの位相を適当に固定すれば，この変換をユニタリまたは反ユニタリにすることがいつでもできる．そうすれば

$$|u'\rangle = T|u\rangle \tag{32}$$

と書くことができ，T がユニタリ変換であるか反ユニタリ変換であるかは，取り扱う変換によって決まる．どちらの場合にも，

$$TT^\dagger = T^\dagger T = 1 \tag{33}$$

が成り立つ．ベクトルの変換を定めた法則 (32) から，密度演算子の変換法則

$$\rho' = T\rho T^\dagger \tag{34}$$

は容易に導かれる．

あらためてオブザーバブルの変換を考えなおす．これは物理的性質を保存するから，上記の変換は平均値を保存する．したがって，どのオブザーバブル B をとっても，

$$\text{任意の } |u\rangle \text{ に対して} \qquad \langle u'|B'|u'\rangle = \langle u|B|u\rangle$$

すなわち

$$\text{任意の } |u\rangle \text{ に対して} \qquad \langle u|(T^\dagger B' T)|u\rangle = \langle u|B|u\rangle$$

が成り立つ[2]．したがって定理 I と性質 (33) により，必ず

---

[2] この結果は，T が線形のときは明らかであるが，$\langle u|B|u\rangle$ が実数であるため，T が反線形のときにも成り立つ．

$$B' = TBT^{\dagger}, \qquad B = T^{\dagger}B'T \tag{35}$$

が成り立つ．

関係式 (35) から一つの重要な性質が出てくる．すなわち，T が線形であるとき，系のオブザーバブルのあいだの代数的関係はすべてこの変換によって保存され，T が反線形であるときは複素共役な関係に置き換えられる．

このことによって，オブザーバブルの変換法則にはきわめて強い制限条件が課せられる．任意のオブザーバブル B は系の基本オブザーバブル $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n, \cdots$ のある実関数 $F(\xi)$ である．そして B の変換 B' は必ず $B' \equiv F(\xi')$ である．それゆえ，基本オブザーバブルの変換法則を与えることによって，変換 $\mathscr{T}$ は完全に決められる．すなわち

$$\mathscr{T}[\xi_n] \equiv \xi'_n = f_n(\xi)$$

となるような関数 $f_1(\xi), \cdots, f_n(\xi), \cdots$ を与えればよいのである．このようなデータの全体はまた ξ' の交換関係を定める．この交換関係は上に述べた代数的関係保存の性質を満たさなければならない．このとき，二つの可能性しかない．この変換によって基本交換関係は保存されるか，または符号を変える(3)．第一の場合，この変換に結びついた演算子 T は線形であり，第二の場合，反線形である（(26 a)，(26 b) を参照）．

演算子 T は関係

$$\xi'_n = T\xi_n T^{\dagger} \tag{36}$$

を満たさなければならない．T の物理的性質はすべてこの関係に含まれている．それにもかかわらず，これらの関係だけから T を完全に決定することはできない．同じ関係を満たすもう一つのユニタリ（あるいは反ユニタリ）演算子を T_1 とする．(書き方を簡潔にするため添字 n を省けば)，

$$T_1{}^{\dagger}\xi' T_1 = \xi,$$

したがって

$$T_1{}^{\dagger}T\xi T^{\dagger}T_1 = \xi,$$

すなわち

$$\text{任意の}\ \xi\ \text{に対して} \qquad [T_1{}^{\dagger}T, \xi] = 0 \tag{37}$$

---

(3) 古典力学において取り扱う変換は，系の力学変数の各組 $(A_{\text{cl.}}, B_{\text{cl.}})$ に対してポアッソン括弧式

$$\{A_{\text{cl.}}, B_{\text{cl.}}\}$$

を保存するもの（正準変換）である．同じように，量子力学において物理的性質を保存する変換は，対応する式

$$\frac{1}{i\hbar}[A, B]$$

を保存するものである．

が成り立つ．オブザーバブル ξ の全体に関して状態空間 $\mathcal{E}$ が既約であること，すなわち $\mathcal{E}$ のなかに ξ に関して不変な（真）部分空間が存在しないことを仮定すれば，性質 (37) が成り立つのは，$T_1^{\dagger}T$ が定数となるときに限る．

この結果はシューア (Schur) の補助定理（付録D，§8）に含まれるが，直接にはつぎのようにして証明される．交換するオブザーバブルの完全集合に共通な一つの固有状態を $|u\rangle$ とする．これらのオブザーバブルと $C\equiv T_1{}^{\dagger}T$ は交換するから，$|u\rangle$ は必ず C の固有ベクトルである．すなわち $C|u\rangle=c|u\rangle$．しかし，C はこの系のオブザーバブルの任意の関数 $F(\xi)$ と交換するから，

$$\text{任意の } F(\xi) \text{ に対して} \qquad CF(\xi)\,|u\rangle = cF(\xi)\,|u\rangle$$

も成り立つ．ところで，$F(\xi)\,|u\rangle$ の形をしたベクトルの全体で張られる空間は $\mathcal{E}$ の部分空間であるが ξ に関して不変である．既約性の仮定により，これは $\mathcal{E}$ そのものでなければならない．したがって $C=c$.

これまでいつも仮定してきたように，状態空間に属するどのベクトルも交換するオブザーバブルの完全集合の固有ベクトルとみなされるとすれば，上に述べた $\mathcal{E}$ の既約性は自動的に保証される（問題1）．当然のことながら，ここで問題になっているオブザーバブルは物理的オブザーバブルである．われわれはつねに空間 $\mathcal{E}$ が物理的オブザーバブルに関して既約であると仮定しよう[4]．このことを承認すれば，T と T_1 がユニタリであるから定数 c の絶対値は必ず1である．したがって

$$T_1 = \mathrm{e}^{i\alpha}\,T$$

と書くことができる．

要約すれば，各変換 $\mathcal{T}$ に一つのユニタリまたは反ユニタリ演算子 T が対応し，系の基本変数の変換法則（式 (36)）により T は位相因数を除いて定められる．変換が交換関係を保存するとき T はユニタリであり，符号を変えるとき反ユニタリである．

T の位相の選び方はまったく任意であり，変換の物理的性質にはすこしも影響しない．実際，オブザーバブルの変換法則にも，密度演算子の変換法則にも，演算子間のいろいろな代数的処理にも影響しない．

§ 7. 変換群

考えられるいろいろな変換を使って，いくつかの変換群がつくられる．ここで群という言葉は数学における意味に用いる（付録D，§2を参照）．

二つの変換 $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2$ の積 $\mathcal{T}_{21}\equiv\mathcal{T}_2\mathcal{T}_1$ は，$\mathcal{T}_1$ のつぎに $\mathcal{T}_2$ をつづけて適用するこ

(4) 第13章の脚注(14)（130頁）にあげた文献を参照．このなかでは既約性に関する上記の仮定が捨てられている．

とによって得られる変換である．変換演算子 T_{21} は位相因数を除いて積 T_2T_1 に等しい．このことから，この型の積は結合法則を満たすが，必ずしも交換法則を満たさない．

恒等変換 $\mathscr{I}$ は各オブザーバブルをそれ自体に移す変換である．その演算子は任意に定められた一つの位相因数を掛けることである．

一つの変換 $\mathscr{T}$ の逆変換 $\mathscr{T}^{-1}$ は関係 $\mathscr{T}^{-1}\mathscr{T}=\mathscr{T}\mathscr{T}^{-1}=\mathscr{I}$ によって定められる．$\mathscr{T}$ によって定まる力学的状態のあいだの対応は一対一であるから，この逆変換はつねに存在する．

たとえば，§6で定義した変換の一つ一つは，ある一つの群 $\mathscr{G}$ に属する要素の一つとみなされる．

あらゆる群のうちで，物理的意味が最も直接に見られるものは空間の変換群(*)（並進，回転，反転）およびいろいろなその部分群である．これらのなかから，並進群，（一点のまわりの）回転群，移動群（並進×回転)(*)，一点に関する対称変換群，平面に関する対称変換（鏡映）群，回転－反転群（一点のまわりの回転×同じ点に関する対称変換），結晶に関する対称操作の群をあげておく．

前章では，これらと違った種類の群，すなわち相似粒子の置換群に出会った．また，いくつかの変数を残りの変数から切り離し，それらの置換だけを考えることもあった．特に荷電空間における置換群が取り上げられ，核子系の場合には，アイソトピック回転群，すなわち荷電空間における回転群がこれに伴って得られた．

いろいろな変換のうちで，直接に時間を含むものは別に扱う方が便利である．その例として，何よりもまずガリレイ時空座標の変換群があることを，ここでは参考までに指摘しておく（問題7）．ガリレイ時空座標の変換は，非相対論の範囲で純ローレンツ変換と同値なものである．純ローレンツ変換と空間の回転とをあわせると固有ローレンツ群が生じる．これは第5部で問題にしよう．他方，時間におけるずらし (translation) の群があり，最後に時間反転がある．時間のずらしと反転は第IV節で研究する．今後本節において取り扱う変換は，直接に時間を含まないものに限る．

§ 8. 変換演算子の群

変換 $\mathscr{T}_1, \mathscr{T}_2, \cdots, \mathscr{T}_i, \cdots$ の集合を $[\mathscr{T}]$ とする．この集合の各要素 $\mathscr{T}_i$ には一つの演算子 T_i が結びつけられ，T_i によって状態空間のベクトルと演算子の変換が定められる．T_i の物理的性質から T_i を決めようとすれば，位相因数だけ残るけれども，しばらくはこれを任意に選んで固定しておく．こうして変換演算子の集合 $[T]$ が得られ，$[T]$ の要素は $[\mathscr{T}]$ の要素と一対一に対応する．

(*) ［訳注］ここでいう変換は3次元空間の合同変換である．そのうち，正のもの（右手系を保つ変換）を移動 (déplacement) と呼んでいる．

いま，$[\mathscr{T}]$ は一つの群 $\mathscr{G}$ であると仮定する．このことから，$[T]$ も同じ性質をもつとは必ずしも言えない．実際，$[\mathscr{T}]$ と $[T]$ との対応において，位相因数を無視しない限り積は保存されない．積

$$\mathscr{T}_k = \mathscr{T}_j \mathscr{T}_i$$

の一つ一つに対して，

$$T_k = e^{i\alpha^k_{ji}} T_j T_i$$

となり，α^k_{ji} は T_i, T_j, T_k の位相の選び方で定まる一つの位相である．$[T]$ が群であるためには，位相 α^k_{ji} をすべて0にすることが必要で，このとき $[T]$ は $\mathscr{G}$ と同型になる．

$[T]$ が群の性質をもつように T_i の位相を選ぶ方法があれば，明らかにこれがわれわれに必要な選び方である．この可能性は，いくつかの群に対しては事実存在するけれども，すべての群に対しては存在しない．たとえば，置換群（第14章）には存在するが，系が半整数スピンの粒子を奇数個含むときの回転群（第13章，§15）には存在しない．事実，後者の場合には，第13章の式（60）で定義される回転演算子 $R(\alpha\beta\gamma)$ の全体は確かに群を作るが，各回転 $\mathscr{R}$ に対応する演算子 R は二つあって反対の符号をもつ．二つのうちの一つを集合 $[R]$ の要素として選べば，回転と回転演算子のあいだに一対一の対応がつけられるが，この対応は符号を無視しない限り積を保存しないから，集合 $[R]$ は群の性質をもたない．

群の性質をもつ変換演算子の集合を得るためには，場合により各 $\mathscr{T}_i$ に一つの演算子 T_i ではなく，位相因数だけ互いに異なる変換演算子の集合 (T_i) を対応させることが必要になる．(T_i) をうまく選べば，これから得られる変換演算子の集合 $\{T\}$ は一つの群 G をつくり，この群は群 $\mathscr{G}$ に準同型となる．変換 $\mathscr{I}$ に対応する演算子の集合を（1）とする．（1）は演算子1を要素として含み，場合によっては1に位相因数を掛けて得られる演算子をいくつか1のほかに含む．これは G の不変部分群であり，商群 $G/(1)$ は $\mathscr{G}$ に同型である（付録D，§5を参照）．

このように，群の性質をもつ集合 $\{T\}$ は幾通りもつくられる[5]．実際の場合は，そのうちの一つを選んで固定する．もちろんできるだけ簡単なものを選ぶのである．こうして群 $\mathscr{G}$ に準同型な変換演算子群 G が得られる．

現在までのところ，量子論において出会うすべての場合を通じて，G はいつもつぎの

---

(5) そのうちの一つで最も複雑なものは，各 $\mathscr{T}_i$ に対して関係（36）を満たす演算子を全部結びつけることによって得られる．この場合に (T_i) の要素を全部得るには，そのうちの一つにあらゆる位相因数を掛ければよい．実際には，T_i に実の条件をつけ，それにより符号を除いて位相因数を定め，群の性質を破らないで済ますことがつねに可能である．そうすれば集合 (T_i) は互いに反対符号をもつ二つの要素だけから成る（注(15)を参照）．

ように選ぶことができる．$\mathcal{G}$ の各要素に対応するものは，Gに属するただ一つの演算子である（同型）か，またはそうでなければ，互いに反対の符号をもつ二つの演算子である．系が偶数個の半整数スピンを含むときには，いつも第一の可能性が起こりうる．第二の可能性は半整数スピンの回転に際してすでに現われている．これについてのもう一つの例は，時間反転に関連して見いだされよう．系が奇数個の半整数スピンを含むときにはいつでも，第二のものが一般的な規則を構成する．

§9．　連続群と無限小変換．並進．回転

事柄を明らかにするため，いくつかの群 $\mathcal{G}$ に対して群 G をつくってみよう．まず連続群——すなわち一つまたはいくつかの連続なパラメータに依存する無限個の要素をもつ群——を考え，そのなかでも特に，すべての有限な変換が無限小変換の繰り返しによってつくり出される場合を調べる．空間の回転群や並進群の場合がこれである．このときには，オブザーバブルの無限小変換が与えられさえすれば，この群に属する任意の変換に対してオブザーバブルの変換法則を知ることができる．この群に属する無限小変換の一つ一つに対して，一つの無限小変換演算子，すなわち1に限りなく近いユニタリ演算子(6)が結びつけられる．

話を簡明にするため，群の要素は連続なパラメータ α だけで定まり，α は

$$\mathcal{T}(\alpha)\xrightarrow[\alpha\to 0]{}\mathcal{I}$$

となるように選んであると仮定する．$\delta\alpha$ に関する1位の項までとれば，$\mathcal{T}(\delta\alpha)$ に結びついた無限小変換演算子は

$$T(\delta\alpha)=1-\mathrm{i}\Theta\delta\alpha \tag{38}$$

と書かれ，Θ はエルミート演算子である（T がユニタリであるから）．

オブザーバブル ξ が変換 $\mathcal{T}(\delta\alpha)$ によって $\xi+\delta\xi$ に変換されるならば，

$$\delta\xi=-\mathrm{i}\,\delta\alpha[\Theta,\xi],$$

すなわち

$$[\Theta,\xi]=\mathrm{i}\frac{\delta\xi}{\delta\alpha} \tag{39}$$

が成り立つ（第7章（95））．与えられた変換 $\mathcal{T}(\delta\alpha)$ に対して $\delta\xi/\delta\alpha$ は知られており，関係式（39）によって Θ は定数を除いて定められる(7)．

---

(6)　これは反ユニタリ演算子ではありえない．実際，交換しない二つのオブザーバブルを考えると，無限小変換によってこれらは無限小の変化を受ける．それゆえ，これらの交換子は有限な変化を受けることができない．すなわち符号を変えることは不可能である．

(7)　古典力学においては，無限小移動 $\mathcal{T}(\delta\alpha)$ による各変数 ξ の変分 $\delta\alpha\cdot\partial\xi/\partial\alpha$ がポアッソン括弧式　↗

一例として軸 Ox に沿う一つの粒子の移動を考える．この粒子の位置を $\boldsymbol{r}\equiv(x,y,z)$，運動量を $\boldsymbol{p}\equiv(p_x,p_y,p_z)$，スピンを $\boldsymbol{s}\equiv(s_x,s_y,s_z)$ とする．軸 Ox 方向に長さ a だけずらす移動 $\mathscr{T}_x(a)$ によって，9 個の基本変数のうち不変でないものは変数 x だけであり，x は $x-a$ に変換される(8)．すなわち

$$T_x(a)\,x\,T_x{}^{\dagger}(a) = x-a.$$

特に無限小変換 $\mathscr{T}_x(\delta a)$ によって，$\delta x=-\delta a$ であり，他の変分 $\delta y,\cdots,\delta s_z$ はすべて 0 である．それゆえ，対応するエルミート演算子 Θ_x は交換関係

$$[\Theta_x, x] = -\mathrm{i}, \qquad [\Theta_x, y] = \cdots = [\Theta_x, s_z] = 0$$

を満たし，その結果

$$\Theta_x = \frac{p_x}{\hbar}+k_0$$

が得られる．ここで k_0 は任意の実定数であるが，今後はこれを 0 に等しくとろう．N 個の粒子から成る系の並進に拡張することも困難ではなく，結果は

$$\boxed{\Theta_x = \frac{P_x}{\hbar}} \tag{40}$$

となる．ただし $P_x=\sum_{i=1}^{N}p_x^{(i)}$ は N 粒子系の<u>全運動量の Ox 成分</u>である．

このようにして，無限小並進 $\mathscr{T}_x(\delta a)$ には無限小ユニタリ演算子

$$T_x(\delta a) = 1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}P_x\,\delta a$$

が結びつけられ，有限な変換 $\mathscr{T}_x(a)$ にはユニタリ演算子

$$T_x(a) = \exp\left(-\mathrm{i}\,P_x a/\hbar\right)$$

が結びつけられる．このように定められた演算子 T_x の全体は一つの群をつくり，それは

↘

$$\frac{\partial\xi}{\partial\alpha} = \{\tau,\xi\}$$

によって定められる．ただし τ は変数 α の共役モーメントである．オブザーバブル $\hbar\Theta$ は τ の量子論的類似である [$\boldsymbol{u}$ を軸とする無限小回転を考えているときには，τ は角運動量の $\boldsymbol{u}$ 方向の成分である；$\boldsymbol{u}$ 方向の並進ならば，τ は運動量の $\boldsymbol{u}$ 方向の成分である]．

(8) x の変換 x' は確かに $x-a$ であって，$x+a$ ではない．実際，〔x の〕固有値 b に対する x の固有ベクトルを $|b\rangle$ とすれば，その変換 $|b'\rangle$ は〔x の〕固有値 $b+a$ に対する x の固有ベクトルである．すなわち

$$x|b\rangle = b|b\rangle, \qquad x|b'\rangle = (b+a)|b'\rangle.$$

ところが，オブザーバブルの変換の定義そのものにより，

$$x'|b'\rangle = b|b'\rangle.$$

これから

$$x' = x-a.$$

この説明を第13章，§12 の説明と比較せよ．

Ox 方向の並進群と同型である．特に

$$T_x(a)T_x(b) = T_x(b)T_x(a) = T_x(a+b)$$

が成り立つ．

Ox 方向の並進群は本来の並進群の部分群である．系の力学的状態が受ける並進をベクトル $\boldsymbol{a}$ で表わせば，$\boldsymbol{a}$ を与えることによって特殊な並進 $\mathcal{T}(\boldsymbol{a})$ が一つ定められる．それゆえ，並進群は3個の連続なパラメータとして $\boldsymbol{a}$ の3成分をもつ．その合成の法則は

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{a})\mathcal{T}(\boldsymbol{b}) = \mathcal{T}(\boldsymbol{b})\mathcal{T}(\boldsymbol{a}) = \mathcal{T}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})$$

である．さきに得た結果を任意の並進に一般化すれば，無限小並進 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon})$ には演算子

$$\boxed{T(\boldsymbol{\varepsilon}) \simeq 1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{\varepsilon})} \tag{41}$$

が結びつけられる．ただし $\boldsymbol{P}$ はこの系の N 粒子の全運動量である．したがって $\mathcal{T}(\boldsymbol{a})$ に結びつけられる演算子は

$$\boxed{T(\boldsymbol{a}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}} \tag{42}$$

である．このように定められた演算子 T の全体は一つの群をつくり，

$$T(\boldsymbol{a})T(\boldsymbol{b}) = T(\boldsymbol{b})T(\boldsymbol{a}) = T(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})$$

であるから，この群は並進群に同型である．

回転群は3個のパラメータをもつ連続群のもう一つの例になっている．回転演算子はすでに第13章で定義されている．第13章の定義式 (55) は (41) と比較されよう．並進群において全運動量 $\boldsymbol{P}$ が演じる役割を，回転群においては全角運動量 $\boldsymbol{J}$ が演じる．全角運動量の $\boldsymbol{u}$ 方向の成分 $(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J})$ は第13章の交換関係 (56) と (57) により定数を除いて定められる．これらの交換関係はそれぞれスカラー・オブザーバブルとベクトル・オブザーバブルに対して $\boldsymbol{u}$ のまわりの無限小回転を与えるものである．$\boldsymbol{J}$ そのものがベクトル演算子であるという条件によって，上記の任意定数は固定される(9)．

回転演算子 R は無限小回転の積として定められる．こうして第13章の式 (60) が得られ，この式は (42) と比較されよう．このように定められた演算子の全体は群をつくる．系が半整数スピンを偶数個含むときには，この群は回転群に同型であるが，奇数個のときにはただ準同型であるにすぎない．この点はすでに論じたからここで繰り返さない．

(42) と第13章 (60) で定義された演算子 T と R，およびそれらの積の全体はまた一つの群をつくる．系が半整数スピンを偶数個含むとき，この群は移動群に同型である．そうでないときには，移動群に準同型であるにすぎず，向きの反対な二つの演算子が移動群の各要素に対応する．

---

(9)　この条件は，演算子 $R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon)$ がある群の無限小演算子であるという条件と同値．

§ 10. 有限群．反転

すべての群のうちでも，一点に関する反転の群は疑いなく最も単純なものである．これは全部で二つの要素，すなわち恒等変換 $\mathcal{I}$ と本来の意味での反転 $\mathcal{S}_0$ から成り，$\mathcal{S}_0^2 = \mathcal{I}$ である．変換 $\mathcal{S}_0$ により，極性ベクトル $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}$ は符号を変え，軸性ベクトル $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{s}$ は不変である．$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ が同時に符号を変えるから，この変換によって軌道変数の交換関係は保存される．また，スピンの成分の交換関係も保存される．それゆえ，1粒子の反転を定める演算子 S_0 は線形演算子である．S_0 はユニタリ演算子で，関係式

$$S_0 \boldsymbol{r} S_0{}^\dagger = -\boldsymbol{r}, \qquad S_0 \boldsymbol{p} S_0{}^\dagger = -\boldsymbol{p}, \qquad S_0 \boldsymbol{s} S_0{}^\dagger = \boldsymbol{s} \tag{43}$$

にしたがう．この式によって S_0 は位相を除いて定められる．さらに，演算子 S_0 と 1 とが反転群に同型な群をつくるためには，

$$S_0^2 = 1 \qquad (S_0 = S_0{}^\dagger) \tag{44}$$

であることが必要であるから，S_0 の位相は符号を除いて定められる．

一つの表現，たとえば表現 $\{\boldsymbol{r}, s_z\}$ の基底ベクトルに対する S_0 の作用を与えると，S_0 は完全に決められる．われわれは定義として

$$S_0|\boldsymbol{r}\mu\rangle = |(-\boldsymbol{r})\mu\rangle \tag{45}$$

を採用する．この定義は確かに条件 (43) と (44) に適する（問題2）．この定義により，波動関数の反転は規則

$$S_0\psi(\boldsymbol{r}, \mu) = \psi(-\boldsymbol{r}, \mu)$$

によって与えられる．演算子 S_0 は第13章，§23 で導入された反転演算子にほかならない．これは二つの固有値 $+1$ と -1 をもつオブザーバブルである．以上の考察を多粒子系に拡張するとき困難は生じない．

反転 $\mathcal{S}_0$ はすべての回転 $\mathcal{R}$ と交換する．反転群の変換と回転群の変換の積の全体は回転-反転群をつくる．S_0 もまたすべての回転演算子と交換することに注意する．実際，回転演算子はすべて全角運動量 $\boldsymbol{J}$ の関数であり，S_0 は $\boldsymbol{J}$ と交換する．なぜなら，(43) により，

$$S_0 \boldsymbol{J} S_0{}^\dagger = \boldsymbol{J}$$

となるからである．

S_0，演算子 R およびこれらの積の全体から成る集合もまた群をつくる．群 $[R]$ が回転群に同型である（全スピンが整数である）とき，この群は回転-反転群に同型である．そうでない（全スピンが半整数である）とき，この群は回転-反転群に準同型であるにすぎない．回転-反転群の各要素に，反対の符号をもつ二つの演算子が結びつけられる．特に，純反転に結びつけられる二つの演算子は $+S_0$ と $-S_0$ であり，恒等変換に結びつけられる二つの演算子は $+1$ と -1 である．

別の型の反転として，平面に関する鏡映(*)を考えよう．この平面に垂直な単位ベクトルを $\boldsymbol{u}$ で表わし，問題の鏡映を $\mathcal{S}_{\boldsymbol{u}}$ で表わそう．$\mathcal{S}_{\boldsymbol{u}}$ は回転－反転群に属する特殊な変換，すなわち $\boldsymbol{u}$（あるいは $-\boldsymbol{u}$）のまわりの π の回転と $\mathcal{S}_0$ との積

$$\mathcal{S}_{\boldsymbol{u}} = \mathcal{S}_0 \mathcal{R}_{\boldsymbol{u}}(\pi) \tag{46}$$

である．

$$\mathcal{S}_{\boldsymbol{u}}^2 = \mathcal{I} \tag{47}$$

に注意する．その結果，$\mathcal{S}_{\boldsymbol{u}}$ と $\mathcal{I}$ とは一つの群をつくり，この群の研究は一点に関する反転の研究を敷き写しにすることができる．また，関係 (46) によって，一方の性質を他方の性質から導くこともできる．

ただ一つの粒子の研究に限ろう．演算子 $S_{\boldsymbol{u}}$ は線形ユニタリ演算子で，関係式

$$\begin{aligned} S_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{r} S_{\boldsymbol{u}}^\dagger &= \boldsymbol{r} - 2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{r}) \\ S_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{p} S_{\boldsymbol{u}}^\dagger &= \boldsymbol{p} - 2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{p}) \\ S_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{s} S_{\boldsymbol{u}}^\dagger &= -\boldsymbol{s} + 2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{s}) \end{aligned} \tag{48}$$

にしたがう．$S_{\boldsymbol{u}}$ に対しては表現

$$S_{\boldsymbol{u}} = S_0 R_{\boldsymbol{u}}(\pi) = S_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})} \tag{49}$$

をとることができる．これから

$$S_{\boldsymbol{u}}^2 = S_0^2 \mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})} = (-)^{2J} \tag{50}$$

が得られる．したがって位相をこのように選べば，スピンが半整数のとき

$$S_{\boldsymbol{u}}^2 = -1$$

となる．変換演算子の全体が群をつくるという条件を守るには，$\mathcal{S}_{\boldsymbol{u}}$ に二つの演算子 $S_{\boldsymbol{u}}$ と $-S_{\boldsymbol{u}}$ を結びつける必要がある(10)．

もう一つの型の有限群は，n 個の相似粒子の置換群である．この群はすでに第14章で研究された．各置換に対して線形ユニタリな置換演算子が結びつけられている．このようにして得られた演算子の全体は，置換群〔n 次対称群〕に同型な群をつくる(11)．これらのこ

(*) ［訳注］　さきにも断わったように（145頁），原書では反転（$x \to -x$, $y \to -y$, $z \to -z$）と鏡映（たとえば yz 面に対してなら，$x \to -x$, $y \to y$, $z \to z$）とをともに réflexion と呼んでいる．われわれはこれらを反転（英語 inversion），鏡映（英語 reflexion）と区別して呼ぶことにする．

(10) 群 $\{\mathcal{S}_{\boldsymbol{u}}, \mathcal{I}\}$ だけに限るならば，$S_{\boldsymbol{u}} = \mathrm{i}^{2J} S_0 R_{\boldsymbol{u}}(\pi)$ と置く方が望ましい．こうすれば $S_{\boldsymbol{u}}^2 = 1$ が得られる．このように新しく位相を選べば，乗法規則 (46) はもはや符号を除いてしか保たれない．

(11) 奇置換に対する演算子を全部反対符号のものに置き換えても，同じ結果が得られたはずである．位相をこのように新しく規約しても，第14章の説明はすべてそのまま繰り返されるであろう．異なる点は，ぐあいの悪い符号（－）が公式のなかに氾濫することだけであって，結果はすこしも変わらない．

とはここでもう一度論じないが，重要な注意を一つだけ付け加えておく．置換は空間の変換と交換する．置換演算子と空間の変換演算子とのあいだにも，それらのつくりかたそのものから考えれば，このような交換可能性が見られる．

III. 変化の方程式の不変量と保存法則

§ 11. 不変オブザーバブル

本来の意味における不変量の問題に入ろう．$\mathcal{G}$ は一つの変換群であるとする．対応する変換演算子群を G とし，集合 G に属する任意の演算子を T_i で表わす．われわれはすべての演算子 T_i が線形（そしてユニタリ）であると仮定する．反線形演算子の導入を必要とする変換は時間反転だけであるが，これについては第IV節で調べる．

オブザーバブル Q がこの群に属する変換に関して不変であるということは，$T_iQT_i^\dagger = Q$，すなわち

$$\text{任意の } T_i \text{ に対して} \qquad [Q, T_i] = 0 \tag{51}$$

という条件によって表わされる．

回転群の場合には，この交換規則から生じる結果がすでに分析されている（第13章，§17）．群の概念を使い，群 G の線形表現の性質を利用すれば（付録D，特にその§9を参照），それらの結果をごく一般的な形に定式化することができる．群 G に合わせた標準表現の基底ベクトルを $|\tau j\mu\rangle$ で表わす．これらのベクトルをしるしづけているのは3個の量子数（あるいは量子数の3組）である．j は $|\tau j\mu\rangle$ が属する既約表現を示す．μ は同じ既約表現の基底ベクトルを互いに区別する役割を果たす．τ は必要に応じて付け加えられる量子数であり，直交する同値な既約部分空間を互いに区別する．われわれは第13章，§6のときと同じ記号を故意に利用する．目下の議論はあのときの議論の明白な一般化になっているからである．Q の本質的な性質は第13章の性質 (120) を一般化したものである．すなわち

$$\langle \tau j\mu|Q|\tau' j'\mu'\rangle = \delta_{jj'}\,\delta_{\mu\mu'}\,Q^{(j)}_{\tau\tau'}. \tag{52}$$

きわめて多くの場合，直接には群の概念に訴えることなく，Q の不変性からこの結果を導き出すことができる．そのためには，T_i の関数のなかからつぎのものを求めればよい．

i）この群に属するすべての演算子に対して不変なオブザーバブルで，その固有値が量子数（の組）j を目じるしとするものの集合 J．

ii）互いに交換するが，群のすべての演算子とは交換しないオブザーバブルで，その固有値が μ を目じるしとするものの集合 M．

明らかに，Q, J, M は交換するオブザーバブルの集合をつくり，その結果として，J と M を対角型にするような任意の表現において，Q は特に簡単な行列表現をもつ．こうすれば，個々の特殊な場合についてはいつもこのようにして性質（52）を証明することができる．これは回転の場合に使った方法である．この場合，i）の種類のオブザーバブルとしてオブザーバブル $\boldsymbol{J}^2$，ii) の種類のオブザーバブルとしてオブザーバブル J_z をとっている．回転－反転群の場合には，i）の種類に $\boldsymbol{J}^2$ と S_0——つまり全角運動量と偶奇性——を，ii) の種類にオブザーバブル J_z をとる必要がある．オブザーバブルの集合 M の選び方には，ある任意性があることに注意する．回転の場合には J_z をとることが習慣として認められているが，J_x や J_y あるいは $\boldsymbol{J}$ の他の成分もまた十分に役立つ．

Q の固有状態を得るには，J のはっきり決まった固有値の一つ一つに対して，行列 $Q^{(j)}_{\tau\tau'}$ を別々に対角化すればよい．その結果，各 j に Q の固有値の列 $q_s^{(j)}$ が対応し，必要があればこれらを量子数（の組）s によって互いに区別する．μ のとりうる値の個数（回転の場合は $2j+1$）を d_j とする．これらの値の一つ一つに，同じ行列 $Q^{(j)}_{\tau\tau'}$ が対応する．したがって，この行列の単純な固有値はいずれも d_j 重に縮退した Q の固有値であり，p 重に縮退したこの行列の固有値は pd_j 重に縮退した Q の固有値である．$d_j \neq 1$ のとき，量子数 j に対応する Q の固有値はすべて縮退しており，縮退の位数は d_j の倍数である．この型の縮退は G に関する Q の不変性の直接の結果であり，われわれはこれを **G 縮退**と呼ぶ．

§ 12.　ハミルトニアンの対称性と保存法則

ハミルトニアン H が群 $\mathcal{G}$ の変換によって不変であると仮定する．これは特殊な不変オブザーバブルであり，不変オブザーバブルについて述べたことはすべてこれにあてはまる．

$$G \text{ の任意の演算子 } T_i \text{ に対して} \qquad [H, T_i] = 0 \tag{53}$$

という交換の性質から出発して，J 型と M 型のオブザーバブルをつくる．これらのオブザーバブルと H とを合わせると，同時に対角化されるオブザーバブルの集合がつくられる．さらに，H のスペクトルは G 縮退を示す．

古典力学のときと同じように，ハミルトニアンの対称性から保存法則の存在が導かれる．実際，H と交換する（直接には時間を含まない）オブザーバブルはすべて運動の定数であるから，つぎの自明な性質が得られる．

ある群の〔すべての〕変換によって H が不変であるならば，この群の演算子の関数として表わされるオブザーバブルはすべて運動の定数である．

この性質は特に，さきに定義した集合 (J, M) に属するオブザーバブルによって満たされる．これらは互いに交換するから，その値は同時に正確に定めることができる．

こうして一つ一つの群にいくつかの保存法則が対応する．保存されるオブザーバブルが古典類似をもつときはいつでも，これらの法則は対応する古典保存法則と同じものである([12])．最もよく現われるものを以下にあげる．

i）並進による不変性と全運動量の保存．ハミルトニアンが並進によって不変であるためには，これが無限小並進に関して不変であることが必要十分である．このことは

$$[H, \boldsymbol{P}] = 0 \tag{54}$$

と書かれる．$\boldsymbol{P}$ は系の全運動量である（(41) を参照）．この場合，全運動量の三成分は運動の定数であり，全運動量は保存される．さらに，P_x, P_y, P_z は互いに交換するから，これらの値を同時に正確に定めることができる．これらは時間の経過のなかでそれぞれの値を保つ．

ii）回転による不変性と角運動量の保存（念のためにあげる；回転による不変性は $[H, \boldsymbol{J}] = 0$ と書かれる）．

iii）反転による不変性と偶奇性の保存．一点に関する反転によるハミルトニアンの不変性

$$[H, S_0] = 0 \tag{55}$$

から，偶奇性 S_0 が運動の定数であるという結果が出る．

iv）置換による不変性と対称性の保存．同種粒子を含む系において，ハミルトニアン H はこれらの粒子のあらゆる置換 P に対して不変である．すなわち

$$\text{任意の } P \text{ に対して} \qquad [H, P] = 0.$$

したがって P の関数である任意のオブザーバブルは運動の定数である．その特別な場合として，対称状態および反対称状態への射影子 S および A がある．すなわち

$$[H, S] = 0, \qquad [H, A] = 0.$$

それゆえ，S と A は運動の定数である．すでに第14章で知ったように，演算子 S と A とに関するこの性質は，対称化の要請が内部的に首尾一貫するための必要条件である．

v）荷電独立性と荷電スピンの保存．核子系の全荷電スピンを $\boldsymbol{T}$ とする．核子間の力が電荷に無関係であるとき，ハミルトニアンは荷電スピンの空間における回転に関して不変である．すなわち

$$[H, \boldsymbol{T}] = 0. \tag{56}$$

([12]) これは無限小移動に伴うオブザーバブルの場合である．注([7]) を参照．

それゆえ，$\boldsymbol{T}$ の成分は運動の定数であり，これらの成分の関数である任意のオブザーバブルも同様である．特に $\boldsymbol{T}^2$ と T_z が運動の定数である（注意；T_z の保存法則は単なる電荷の保存法則である）．

§ 13.　力学的状態の変化の法則の不変性

群 $\mathcal{G}$ に関する H の不変性から，シュレーディンガーの時間的変化の演算子 $U(t, t_0)$ について同じ性質が導き出される．この演算子は定義により積分方程式

$$U(t, t_0) = 1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} HU(t', t_0)\,\mathrm{d}t'$$

の解である．両辺に左から T_i，右から $T_i{}^\dagger$ を掛け，T_i のユニタリ性と性質 (53) を考慮に入れると，

$$T_iU(t, t_0)\,T_i{}^\dagger = \ = 1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} HT_iU(t', t_0)\,T_i{}^\dagger\,\mathrm{d}t'$$

が得られる．U と $T_iUT_i{}^\dagger$ は同じ積分方程式を満たすから等しい．したがって

$$G\text{ の任意の演算子 } T_i \text{ に対して}\qquad [U(t, t_0), T_i] = 0. \tag{57}$$

群の変換に対して U が不変であるということから導かれる物理的諸結果のうちには，前の § 12 の主題であった保存法則も含まれる．他方，U と T_i が交換するから，$|\phi(t)\rangle$ が運動方程式の解であるならば，変換されたベクトル $T_i|\phi(t)\rangle$ も同様である．それゆえ，これら二つのベクトルによってそれぞれ表わされる力学的状態はどの瞬間においても変換 $\mathcal{T}_i$ によって互いに対応する．したがって，力学的状態の変化の法則は群 $\mathcal{G}$ の変換に関して不変である．すなわち，

群 $\mathcal{G}$ の一つの変換 $\mathcal{T}_i$ によって互いに導かれる二つの力学的状態は，時間の経過のなかでこの性質を保存する．

この不変性と同じ意味のことを，測定の言葉を借りて言い表わすこともできる．すなわち，

時刻 t_0 において系をある形に準備しておき，あとの時刻 t においてはっきり決まった測定操作をこの系に施すとする．群の一つの変換 $\mathcal{T}_i$ を初期状態（すなわち系を準備するのに用いられた装置）と測定量（すなわち観測に用いられる装置）の双方に施すとき，測定結果は変わらない．

特に，ベクトル $|\varphi\rangle$ によって表わされる純粋な状態に系を準備し，$|\chi\rangle$ によって表わされる純粋な状態にこれが見いだされる確率を測るとしよう．これらの状態はそれぞれベクトル $T_i|\varphi\rangle$ と $T_i|\chi\rangle$ によって表わされる状態に変換される．交換規則 (57) から，確率の等しいこと

$$|\langle\chi|\,T_i{}^\dagger U(t, t_0)\,T_i|\varphi\rangle|^2 = |\langle\chi|U(t, t_0)\,|\phi\rangle|^2 \tag{58}$$

が導かれる.

もっと一般に，系が準備された時刻 t_0 における状態を表わす密度演算子を ρ_0 とし，測定が行なわれる時刻 t におけるこの演算子を ρ とする．典型的な測定とは，測定の対象となっている（いくつかの）量のとる（それぞれの）値が，ある領域 D のなかに見いだされる確率を決定することである．この領域に対応する固有状態がつくる部分空間への射影子を P_D で表わせば，この確率は

$$w = \mathrm{Tr}\,\rho\, P_D = \mathrm{Tr}\, U(t, t_0)\,\rho_0 U^\dagger(t, t_0)\, P_D \tag{59}$$

である.

いま，初期状態 $\rho'_0 \equiv T_i\rho_0 T_i{}^\dagger$ から出発して，初めの実験で取り扱った量から変換された量の測定を行なうとする．領域 D の固有値に対応する射影子は $P'_D \equiv T_i P_D T_i{}^\dagger$ である．それゆえ，この新しい測定の結果は

$$w' = \mathrm{Tr}\, U(T_i\rho_0 T_i{}^\dagger)\, U^\dagger (T_i P_D T_i{}^\dagger) \tag{60}$$

である．跡の性質と T_i のユニタリ性を考えに入れれば，関係 (57) から二つの結果が等しいこと，すなわち

$$w' = w \tag{61}$$

が導き出される．また，この等式を確かめるためには，どんな $|\varphi\rangle$ と $|\chi\rangle$ に対しても (58) が成り立つことを確かめてもよい.

ここまでは，H がある対称性をもつという仮定から出発し，それから引き出されるいろいろな結果のうち，H の対称性に対応する群 $\mathcal{G}$ に関して力学的状態の変化の法則が不変であることを見た．逆に，この不変性を変化の法則に課せられた基本要請とすることもできる．これは，群のすべての変換 $\mathcal{T}_i$ に対して，どのような $|\varphi\rangle$ と $|\chi\rangle$ についても等式 (58) が成り立つこと，あるいはまた定理 II により，U と $T_i{}^\dagger U T_i$ とが位相を除いて等しいことを要請するのと同じである．すなわち

$$T_i{}^\dagger U(t, t_0)\, T_i = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i} U(t, t_0). \tag{62}$$

位相因数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i}$ はまたきわめて厳しい制限を受ける．物理学で出会う大部分の群に対して，この因数はすべて必ず 1 に等しい[13].

---

[13] このことは，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i}$ が群 $\mathcal{G}$ の 1 次元の表現をつくり，これらは t の連続関数であって，$t \to t_0$ のとき 1 に収束するという事実に由来する．$\mathcal{G}$ が有限群であるとき，あるいはすくなくとも $\mathcal{T}_i$ が有限（部分）群の要素であるとき，$\mathcal{T}_i^p = \mathcal{I}$ となるような整数 p が存在する．したがって $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i}$ は 1 の p 乗根の一つである．上に述べた連続の条件から $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i} = 1$．一点に関する反転または一平面に関する鏡映は，この種類に入る変換の例である．一方，群 $\mathcal{G}$ の 1 次元の表現が恒等表現しかないならば，群の任意の変換に対して明らかに $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i} = 1$ が成り立つ．回転群，移動群はこの種類に入る．これに反して，変化の法則の不変群(*) が単に並進群であるとき，これだけのデータからすべての位相 α_i が 0 であるということは必ずしも出てこない．↗

系が本来もつべき位相関係を考えたときに位相に関するこの条件が要求されない場合にも，われわれはこれが満たされていると仮定する．これを認めると，不変性の要請は

$$[T_i, U(t, t_0)] = 0$$

と書かれる．この交換の性質を無限小の時間的変化の演算子 $U(t+\mathrm{d}t, t) = 1-(\mathrm{i}/\hbar)H\mathrm{d}t$ に当てはめると，ハミルトニアンの対称条件

$$[T_i, H] = 0$$

がもう一度得られる．

こうして，変化の法則に関する不変性の要求はすべてハミルトニアンの対称性に置き換えられる．外部の場がないところで変化する任意の量子系に対して，ふつうは移動群に関する不変性を要請する．このことは，空間が均質であること（並進による不変性）と等方性であること（回転による不変性）を仮定するのと同じである．現在までのところ，この要請はどんな実験結果とも矛盾していない．

長いあいだにわたって，自然界にある系の変化は反転によっても不変であるということも信じられてきた．事実，系に関係する相互作用が電磁相互作用または本来の核相互作用，すなわち原子核の凝集の原因になっている相互作用以外にないようなすべての現象において，不変性に関するこの要請は実験的に確かめられる．しかしながら，実験の示すところによると，いくつかの相互作用，特に原子核の β 崩壊をもたらす相互作用によってこの要請は破られる．これらの相互作用は前記のものよりはるかに弱い．これらが無視されるときはいつでも，変化の法則は反転によって不変であり，偶奇性は保存される．特に原子物理学の現象で，電磁相互作用しか入ってこない場合にはそうである．

外部の場が現われるとき，変化の法則の不変性は場の対称性によって決まる．これを説明するため，原子物理学から二つの例，シュタルク効果とゼーマン効果を取り出して調べよう．

§ 14.　シュタルク効果とゼーマン効果の対称性

シュタルク効果

一定値 $\mathcal{E}$ をとる外部の電場のなかに一つの原子系を考え，具体的に論じるために，電場の向きは z 軸の方向にあるとする．この場は並進，z 軸のまわりの回転，z 軸に平行な任意の平面に関する鏡映に対して不変である．ここに現われる不変群は，Oz を通る平面に関する鏡映群を並進群に掛けた積である．

重心運動の分離はすでに済ませてあると仮定し，相対変数のハミルトニアン H がとり

↘(*)［訳注］ある物理的対象を不変にする変換の全体は群をつくる．原著者はこれを groupe d'invariance と呼んでいる．適当な訳もないので“不変群”と訳しておくことにする．

うる状態を調べることに限定する．これは Oz を通る平面に関する鏡映群によって不変である．以下の考察はただこの不変性だけに基づいて行なわれる．電場と系の相互作用についての詳細や，結合の力は考察の対象に入ってこない．

Oz を通る平面を任意に選び，これに関する鏡映を $\mathcal{S}_u$ とし，対応する演算子を S_u とする．これの位相は $S_u^2=1$ となるように固定する．ここで取り扱っている群は Oz のまわりの無限小回転と鏡映 $\mathcal{S}_u$ によってつくられるから，群の変換の演算子は J_z と S_u の関数である．それゆえ，独立な運動の定数が全部で二つ得られ，J_z と S_u である．これらは交換せず，

$$S_u J_z S_u = -J_z \tag{63}$$

となる．したがって，H の固有値のうちのいくつかは必ず縮退する．

詳しく述べるために，J_z^2 は J_z および S_u と交換し，その結果，群のすべての演算子と交換することに注意する．J_z^2 はこの群における J 型のオブザーバブルである（§11 の定義）．M 型のオブザーバブルとしては，J_z をとっても S_u をとってもよい．初めの場合は，J_z の固有値によって定常状態を分類し，あとの場合には組 (J_z^2, S_u) の固有値によって分類する．

具体的に考えるために，この系は半整数スピンを偶数個含むと仮定する．J_z はすべての整数値をとりうる．そのうちの一つを m とする．この値に対応する定常状態を $|\ \rangle$ とすれば，$S_u|\ \rangle$ は同じエネルギーをもつ定常状態であり，J_z の固有値 $-m$ に対応する．$m\neq 0$ ならば，これら二つの状態は必ず直交する．つまり，J_z の固有値によって定常状態を分類すれば，符号の反対な二つの固有値 m と $-m$ は同じエネルギー・スペクトルを与え，このスペクトルの各準位は同じ位数の縮退を示す．言いかえると，エネルギー準位は $|m|$ だけによって決まり，$|m|\neq 0$ に対する準位はいずれも偶数位の縮退を示す．

この結果はまた，組 (J_z^2, S_u) の固有値によって定常状態を分類しても得られる．これらの固有値を表わすのに，記号 m^+ または m^- を用いる．m は正の整数または 0 で，その二乗が J_z^2 の固有値に等しく，上の添字は S_u の固有値が $+1$ であるか -1 であるかによって $+$ または $-$ とする．具体的に述べるため，状態 m^+ を考えると，

$$J_z^2|m^+\rangle = m^2|m^+\rangle, \qquad S_u|m^+\rangle = |m^+\rangle.$$

$m\neq 0$ ならば $J_z|m^+\rangle$ は 0 でなく，(63) により，

$$S_u(J_z|m^+\rangle) = -J_z S_u|m^+\rangle = -(J_z|m^+\rangle)$$

となる．それゆえ各状態 m^+ には，J_z の作用によって状態 m^- が対応する．前者が定常状態であるならば後者もそうであり，同じエネルギー準位に対応する．エネルギー準位は正の整数 m だけで定まり，いずれも偶数位の縮退を示す．$m=0$ のときは例外であって，状態 0^+ と 0^- のスペクトルは異なることもありうる．

ゼーマン効果

今度は一様な磁場 $\mathcal{H}$ のなかにある原子系を考え，磁場は z 軸方向に向けられているとする．この軸に平行な平面に関する鏡映によって $\mathcal{H}$ は符号を変える．これに反して，原点に関する反転 $\mathcal{S}_0$ によって $\mathcal{H}$ は不変である．外部の場を不変にする群は並進，Oz のまわりの回転および反転 $\mathcal{S}_0$ からつくられる群である．シュタルク効果のときと同じように，相対変数のハミルトニアン H の対称性を調べるだけにしておく．H はOz のまわりの回転と原点に関する反転によって不変である．反転演算子を S_0 とし，その位相は $S_0^2=1$ となるように固定する．この群に属するすべての変換は，オブザーバブル J_z と S_0 の関数として表わされる．J_z と S_0 は交換する．すなわち

$$S_0 J_z S_0 = J_z.$$

したがって，この群の変換に関する H の不変性から，系統的な縮退はまったく生じない[14].

H, S_0, J_z は同時に対角化され，これら三つのオブザーバブルに共通な固有ベクトルはいずれもこの群の変換によって不変な定常状態を表わす．この結果は H の対称性だけに基づき，系と磁場の相互作用の詳細や結合の力には無関係である．

IV. 時間反転と微視的可逆性の原理

§ 15. 時間のずらしとエネルギーの保存

時間を介入させるすべての変換のうちで，最も簡単なものは時間のずらしである．古典力学においては，時間のずらしによって運動方程式が不変であることから，よく知られたエネルギー保存の法則が導き出される．事実，この法則はハミルトン関数が時間に無関係であることを要求する．量子力学においても類似の性質が得られる．

実際，運動方程式を満たす一つの解を $|\psi(t)\rangle$ とする．時間を τ だけずらしても系の変化の法則が不変であるという要請は，時刻 $t+\tau$ において上記の解が表わす力学的状態を時刻 t において表わすもう一つの解 $|\psi'(t)\rangle$ が存在するという要請と同じである．すなわち

$$|\psi'(t)\rangle = e^{i\alpha(t,\tau)}|\psi(t+\tau)\rangle.$$

運動方程式のすべての解がこの性質をもつためには，時間的変化の演算子が性質

$$U(t, 0) = e^{i\alpha(t,\tau)}U(t+\tau, \tau) \tag{64}$$

をもたなければならない．ただし $\alpha(t, \tau)$ は t と τ によって変わりうる位相である．t が無限小になる極限に上記の性質を適用する．$f(\tau) = \partial\alpha/\partial t|_{t=0}$ と置けば，

---

(14) 言いかえれば，この群の既約表現は必ず1次である．

$$1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(0)\,\mathrm{d}t = (1+\mathrm{i}f(\tau)\,\mathrm{d}t)\left(1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(\tau)\,\mathrm{d}t\right),$$

すなわち

$$H(\tau) = H(0)+\hbar f(\tau) \tag{65}$$

が得られる．変化の法則が任意の時間のずれに対して不変であるならば，(65) はどんな τ に対しても成り立たなければならない．言いかえると，系のハミルトニアンは時刻の(実)関数を除いて定数である．実際には，この関数を 0 としても系の物理的性質はまったく変わらないのである．なぜなら，ハミルトニアン $H(t)$ を時刻 $t=0$ におけるその値に置き換えても，時間的変化の演算子には位相関数 $\exp\left[\mathrm{i}\int_0^t f(t')\,\mathrm{d}t'\right]$ が掛けられるという影響しかないからである（問題 6）．

結論として，系の変化の法則が時間をずらしても変わらないならば，ハミルトニアンは時間に無関係であると仮定してよい．今後はいつもこの仮定をする．そうすると性質(64)は，時間のずれによって時間的変化の演算子が不変であるという法則

$$U(t+\tau,\tau) = U(t,0) \tag{66}$$

に帰着する．

§ 16. 古典力学と量子力学における時間反転

本節の残りで考える系はすべて保存系である．このような系の変化の法則が時間のずらしによって不変であるばかりでなく，時間の反転によっても不変であることがしばしば起こる．この型の不変性は古典力学においても見られる．

古典力学におけるラグランジュ関数 $L_{\mathrm{cl.}}(\dot{q},q)$ は速度に関して 2 次の多項式である．多くの系に対しては，1 次の項が欠けるから，

$$L_{\mathrm{cl.}}(\dot{q},q) = L_{\mathrm{cl.}}(-\dot{q},q)$$

が成り立つ．孤立した粒子から成る系はつねにこの対称性をもつ．静的な外部の場を導入してもこれが破れるとは限らない．たとえば純粋な電場のなかではこの性質が保たれる．これに反して，磁場が存在するときには速度に関する 1 次の相互作用が現われ，その結果対称性が破られる．対称性があるときには，運動量 p は速度の同次 1 次関数であり，ハミルトン関数も同じような対称性をもつ．

もっと具体的な話をするために，このような対称性から生じる結果を特に簡単な場合，すなわち静ポテンシャル内の 1 粒子の場合について調べよう．この場合には，

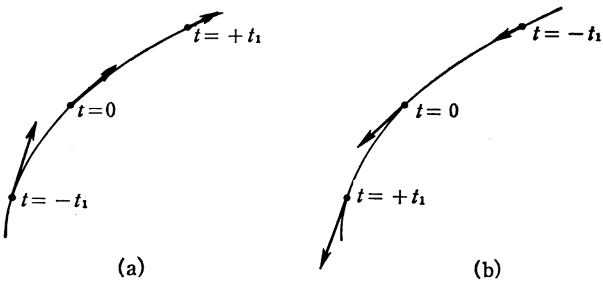
$$H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}) \equiv \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r}) = H(-\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}) \tag{67}$$

が成り立つ．したがって，運動方程式の解 $\boldsymbol{r}(t)$ はすべて時間に関して可逆である．すなわち

$$\boldsymbol{r}_{\text{ren.}}(t) = \boldsymbol{r}(-t) \tag{68}$$

によって定義される関数 $\boldsymbol{r}_{\text{ren.}}(t)$ もまた運動方程式の解である．これら二つの解のあいだの対応関係を図式的に表わしたのが 15・1 図である．一方の解で時刻 t に粒子が占める位置は，他方の解で時刻 $-t$ に占める位置である．一方の解で時刻 t における速度は，他方の解で時刻 $-t$ における速度の逆である．運動量のあいだの対応は速度のあいだの対応と同様である．すなわち

$$\boldsymbol{p}_{\text{ren.}}(t) = -\boldsymbol{p}(-t). \tag{69}$$



15・1 図　時間反転によって互いに対応する二つの古典運動 (a) と (b) を配置空間のなかに表わしたもの：
$\boldsymbol{r}_a(t) = \boldsymbol{r}_b(-t)$，$\dot{\boldsymbol{r}}_a(t) = -\dot{\boldsymbol{r}}_b(-t)$.

今度は類似の量子系を考える．そのシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{70}$$

である．ハミルトニアンは実の演算子であるから，この方程式のなかの t を $-t$ に変え，両辺の複素共役をとれば，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r},-t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\boldsymbol{r})\right]\psi^*(\boldsymbol{r},-t) \tag{71}$$

となることは容易にわかる．言いかえると，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ がシュレーディンガー方程式の解であるならば，波動関数

$$\psi_{\text{ren.}}(\boldsymbol{r},t) = \psi^*(\boldsymbol{r},-t) \tag{72}$$

もまたこの方程式の解である．

二つの解 ψ と $\psi_{\text{ren.}}$ のあいだの対応は，さきに取り扱った古典的な二つの解のあいだの対応（式 (68)，(69)）と驚くほどよく似ている．たまたま時刻 t に行なわれる測定によって得られる位置と運動量の統計的分布をそれぞれ $P(\boldsymbol{r},t)$ と $\Pi(\boldsymbol{p},t)$ で表わせば，

$$P_{\text{ren.}}(\boldsymbol{r},t) = P(\boldsymbol{r},-t) \tag{68'}$$

$$\Pi_{\text{ren.}}(\boldsymbol{p},t) = \Pi(-\boldsymbol{p},-t) \tag{69'}$$

であることが容易に示される.

§ 17. 時間反転の演算. スピンをもたない粒子

シュレーディンガー方程式の解の，時間に関する可逆性は，さきほどの例について確かめたのであるが，その根拠は $\boldsymbol{p}$ を $-\boldsymbol{p}$ に変えてもハミルトニアン $H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})$ が変わらないということにある. 波動力学による表現において，ハミルトニアンが実の微分演算子で表わされる理由も，実はここにあった. そこでわれわれは力学変数と力学的状態に対する一つの変換を定義し，これを時間反転と名づけ，これによって $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ がそれぞれ $\boldsymbol{r}$ と $-\boldsymbol{p}$ に移るようにしたい. この変換を実現する演算子を K で表わし，変換そのものを $\mathcal{K}$ で表わす. 定義により，

$$K\boldsymbol{r}K^{\dagger} = \boldsymbol{r}, \qquad K\boldsymbol{p}K^{\dagger} = -\boldsymbol{p}. \tag{73}$$

この変換は交換関係の符号を変える. したがって K は反ユニタリ演算子である(*). 関係 (73) により，これは位相因数を除いて定められる. 波動力学の表現に結びついた複素共役演算子を K_0 とする. この型の反ユニタリ演算子は §5 で定義されている. この表現において $\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{p}$ を表わす行列はそれぞれ実および純虚であるから，明らかに K_0 は関係 (73) を満たす. それゆえ，時間反転の演算子としてわれわれが選ぶのはこれである：

$$K = K_0.$$

位相をこのように選ぶと，波動関数に対する K の作用は，関数をその複素共役に変換する. すなわち

$$K\Phi(\boldsymbol{r}) = \Phi^*(\boldsymbol{r}).$$

$\boldsymbol{p}$ を $-\boldsymbol{p}$ に変えても H が不変であるという仮定は，

$$[K, H] = 0 \tag{74}$$

を要請することと同じである. この仮定のもとに，(反ユニタリ) 演算子 K をシュレーディンガー方程式の両辺に適用すると，

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K|\psi(t)\rangle = HK|\psi(t)\rangle$$

すなわち，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(K|\psi(-t)\rangle) = H(K|\psi(-t)\rangle)$$

が得られる. したがって，$|\psi(t)\rangle$ がシュレーディンガー方程式にしたがうならば，ベクトル

$$|\psi(t)\rangle_{\text{ren.}} \equiv K|\psi(-t)\rangle \tag{75}$$

もまたこの方程式にしたがう. 任意の時刻 t においてベクトル $|\psi\rangle_{\text{ren.}}$ が表わす力学的状

(*) [訳注] §4, iv) を参照.

態は，時刻 $-t$ においてベクトル $|\psi\rangle$ が表わす状態を時間反転によって変換したものである．こうしてシュレーディンガー方程式の解の可逆性がもう一度見いだされる．

変換 $\mathcal{K}$ を定める関係式 (73) から得られる結果として，$\mathcal{K}$ は空間のすべての変換，すなわち並進，回転，反転〔および鏡映〕と交換する．さらに，演算子 K は第II節で定義されたような空間の変換演算子と交換することに注意する[15]．特に，K は運動量の3成分と反交換する．それゆえ無限小並進の演算子と交換する．同様に，K は角運動量の3成分と反交換する．すなわち

$$K(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})K^{\dagger} = -(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}). \tag{76}$$

したがって無限小回転の演算子と交換する．

§ 18.　時間反転の一般的定義

時間反転という概念をもっと一般の粒子系に拡張するためには，スピン変数の時間反転を定義する必要がある．スピンは特殊な角運動量であるから，その変換法則は軌道角運動量の場合（式 (76)）と同じでなければならない．すなわち，

$$K\boldsymbol{s}K^{\dagger} = -\boldsymbol{s}. \tag{77}$$

時間反転の演算はスピンの向きを反対にする．この定義により，$\mathcal{K}$ と空間の変換，特に回転との交換性が保存される．さらに，(76) と (77) により，K は全角運動量 $\boldsymbol{J}$ の各成分と反交換する．すなわち

$$K\boldsymbol{J}K^{\dagger} = -\boldsymbol{J}. \tag{78}$$

したがって回転演算子とは交換する（問題8を参照）．実際，K は反線形であるから，関係 (78) により，

$$K\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})\varphi/\hbar}K^{\dagger} = \exp\left[+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varphi(K(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})K^{\dagger})\right] = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})\varphi/\hbar}.$$

スピン s の粒子に対する時間反転演算子をつくってみよう．この演算子は関係 (73) と (77) から定められる．表現 $\{\boldsymbol{r}, s_z\}$ に伴う複素共役演算子を K_0 で表わす．この表現における基底ベクトルの相対的な位相は，慣用の規約にしたがって固定する．特に，スピン空間の基底ベクトルは，第13章で定めた標準の選び方によって固定されている．その結果

---

(15) 変換 $\mathcal{K}$ が他の変換 $\mathcal{T}$ と交換するとき，必ず $KT = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}TK$ が成り立ち，位相因数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ は演算子 T の選び方によって定まる．容易にわかるように，補足条件 $KT = TK$ を T に付け加えると，T は符号を除いて定められる．

このことから，変換群 $\mathcal{G}$ が $\mathcal{K}$ と交換するときには，$\mathcal{G}$ に演算子群 G を結びつけるときに生じうる複雑さに関して，いくらかの結論を引き出すことができる．この場合には，(§8 の記号による) (T_i) として，K と交換する二つの変換演算子をとることができる．特に (1) は組 $(+1, -1)$ を表わす．互いに反対符号をもつ二つの演算子から成るこれらの組の全体 $\{T\}$ は明らかに群をつくり，これを群 G として選ぶことができる．

$$K_0 \boldsymbol{r} K_0 = \boldsymbol{r}, \qquad K_0 \boldsymbol{p} K_0 = -\boldsymbol{p} \tag{79}$$

$$K_0 s_x K_0 = s_x, \qquad K_0 s_y K_0 = -s_y, \qquad K_0 s_z K_0 = s_z \tag{80}$$

が成り立つ.

ここで

$$K = TK_0 \tag{81}$$

と置く. $T = KK_0$, $T^\dagger = K_0 K^\dagger$ であるから, (線形) ユニタリ変換 T によって,

$$T\boldsymbol{r}T^\dagger = \boldsymbol{r}, \qquad T\boldsymbol{p}T^\dagger = \boldsymbol{p} \tag{82}$$

$$Ts_xT^\dagger = -s_x, \qquad Ts_yT^\dagger = s_y, \qquad Ts_zT^\dagger = -s_z \tag{83}$$

が与えられる.

関係式 (82) と (83) は一つの回転による変数 $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{s}$ の変換式であるが, この回転はスピンだけのもので, y 軸のまわりに角 π の大きさをもつ. この回転の演算子を $Y^{(s)}$ とすれば,

$$Y^{(s)} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi s_y/\hbar}$$

であり, T と $Y^{(s)}$ は位相因数を除いて等しい. この位相因数は物理的意味をまったくもたないから, われわれはこれを 1 に選んで固定する. こうすれば

$$K = Y^{(s)}K_0 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi s_y/\hbar}K_0. \tag{84}$$

特にスピン 1/2 の粒子に対しては

$$K = -\mathrm{i}\sigma_y K_0. \tag{85}$$

以上のことは N 粒子系の時間反転にもすべて容易に拡張される. 演算子 K は各粒子に関する時間反転演算子のテンソル積である. 標準表現 $\{\boldsymbol{r}^{(1)}s_z^{(1)} \cdots \boldsymbol{r}^{(N)}s_z^{(N)}\}$ に結びついた複素共役演算子を K_0 とし, 固有のスピンを Oy 軸のまわりに角 π だけまわす回転の演算子を $Y^{(S)}$ とすれば, 位相を上記のように固定するとき,

$$\boxed{K = Y^{(S)}K_0 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi S_y/\hbar}K_0} \tag{86}$$

が得られる.

§ 19. 時間反転と複素共役

時間反転 $\mathcal{K}$ は複素共役をとることとたいそうよく似ている. この類似をおし進めて, 今後は二つの (線形) 演算子が時間反転により一方から他方へ変換されるとき, これらは複素共役であるという. 特に, 演算子 Q に対して,

i) $KQK^\dagger = Q$ のとき Q は実

ii) $KQK^\dagger = -Q$ のとき Q は純虚

であるという.

実の定数はすべて実の演算子である. 定数 i は純虚の演算子である. 実の演算子に i を

掛けた積は純虚である．二つの実演算子の積および和は実演算子である．

実という概念をエルミートという概念と混同してはならない．これに関連してつぎの二つの注意が必要である．

a) エルミート共役の場合とちがって，二つの演算子が複素共役であっても，与えられた表現においてこれらを表わす行列が互いに複素共役であるとは限らない．

b) われわれが採用した複素共役の定義は，ただ一つの可能な定義ではない．二乗して $\mathcal{I}$ となるような反ユニタリ変換はいずれも複素共役と同じように取り扱うことができる．

複素共役に対するわれわれの定義によれば，位置のオブザーバブルはすべて実であり，運動量とスピンはすべて純虚である．第II節で定義したような空間の変換演算子は実である（問題8）．

複素共役の概念はベクトルにもひろげられる．すなわち，ベクトル $|\ \rangle$ の複素共役はベクトル $K|\ \rangle$ であると定義する．しかしながら，この型の対応は $K^2=1$ でない限り可逆でない．そして，$\mathcal{K}^2=\mathcal{I}$ という事実から出てくることは，必ず $K^2=1$ であるということではなく，単に K^2 がすべての力学変数と交換すること，したがって一つの定数であるというだけである．容易に示されるように（問題9），この定数の値は K を定めるために採用した位相の選び方には無関係であり，それがとりうる値は $+1$ と -1 だけである．その上，K を表わす式（86）を使って，この値を計算することもできる．K_0 は $Y^{(S)}$ と交換し，$K_0^2=1$ であるから，

$$K^2=(Y^{(S)})^2=\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}S_y/\hbar}, \tag{87}$$

すなわち，この系が半整数スピンの粒子を n 個含むとすれば，

$$\boxed{K^2=(-)^n} \tag{88}$$

が得られる．

$K^2=1$（n が偶数）のときは，ベクトルのあいだの複素共役が可逆な対応になり，実のベクトルを定義することができる．すなわち

$$K|r\rangle=|r\rangle$$

のとき $|r\rangle$ は実であるとする．基底ベクトルがすべて実であるような表現は実の表現であると定義する．

実の基底系をつくるには，つぎのようにする方法がある．はじめに任意のベクトル $|a\rangle$ を選び，$|a\rangle$ と $K|a\rangle$ との線形結合によってノルム1の実ベクトル

$$|a^r\rangle=c|a\rangle+c^*(K|a\rangle)$$

をつくる．$|a^r\rangle$ が実であることは明らかである．定数 c を調節して $|a^r\rangle$ のノルムを1

に等しくする．これがいつも可能であることは容易に確かめられる．つぎに $|a^r\rangle$ に直交するベクトル $|b\rangle$ をとり，ノルム1の実ベクトル $|b^r\rangle$ を同じ方法でつくる．仮定により $K|a^r\rangle = |a^r\rangle$, $\langle a^r|b\rangle = 0$ であるから，

$$\langle a^r|(K|b\rangle) = (\langle a^r|K^\dagger)(K|b\rangle) = \langle a^r|b\rangle^* = 0$$

が成り立ち，その結果 $|b^r\rangle$ も $|a^r\rangle$ に直交する．つぎに $|a^r\rangle$ と $|b^r\rangle$ に直交するベクトル $|c\rangle$ をとり，ベクトル $|c^r\rangle$ をつくる．以下同様であり，このようにしてつくられた系が完全になるまでこの操作をつづける．

実の表現は注目すべき性質をもつ．すなわち，この表現に結びついた複素共役演算子が演算子 K そのものになる．このとき実の演算子はすべて実行列で表わされる．互いに複素共役な二つの演算子は複素共役行列によって表わされる．実表現から実表現を導き出すユニタリ行列は実行列である．

$K^2 = -1$（n が奇数）のときは，実のベクトルが存在しない．しかし，$K = -K^\dagger$ であるから，任意のベクトル $|u\rangle$ に対して

$$\langle u|(K|u\rangle) \equiv \langle u|(K^\dagger|u\rangle) = -\langle u|(K|u\rangle) = 0$$

が成り立つ(*)．それゆえつぎの注目すべき性質が得られる．

一方が他方の複素共役になっている二つのベクトル $|\ \rangle$ と $K|\ \rangle$ は直交する．

さらに，ベクトル $|b\rangle$ がベクトル $|a\rangle$ とその複素共役 $K|a\rangle$ に直交するとき，その複素共役 $K|b\rangle$ もまた双方に直交する．この性質は容易に確かめられ，これから $K^2 = 1$ の場合の議論をそのままたどって，二つずつ複素共役なベクトルから成る基底系の存在することが導かれる．

§ 20. 微視的可逆性の原理

与えられた系の変化の法則が，場合によっては空間のある変換に関して不変であること（§13）を要請するのと同じように，時間に関して可逆であることを要請することもできる．この要請によれば，$|\psi(t)\rangle = U(t,0)|\psi\rangle$ によって表わされる系の運動が可能であるとき，ベクトル

$$|\psi(t)\rangle_{\text{ren.}} = KU(-t,\ 0)|\psi\rangle$$

によって表わされる系の運動も可能であり，したがってこのベクトルは $U(t,0)K|\psi\rangle$ と位相因数を除いて等しい．どんな $|\psi\rangle$ に対してもこの性質が満たされることを仮定すれば，時間に関する可逆性の要請は

$$U(t,0)K = e^{i\alpha(t)}KU(-t,0)$$

(*)［訳注］§4の式（22）を参照．

と書き表わされる．

この要請が適用される系はいつでも保存系である．ハミルトニアンを H で表わすならば，

$$U(t,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar},\qquad U(-t,0)=\mathrm{e}^{+\mathrm{i}Ht/\hbar}=U^\dagger(t,0),$$

したがって

$$U(t,0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}(KU^\dagger(t,0)K^\dagger) \tag{89}$$

となる．両辺に左から K を，右から $K^\dagger$ を掛け，$K^2=K^{\dagger 2}=(-)^n$ であることを使えば，

$$U^\dagger(t,0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}(KU(t,0)K^\dagger)$$

が導かれる．この関係式を，(89) のエルミート共役

$$U^\dagger(t,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}(KU(t,0)K^\dagger)$$

と比較すれば，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ のとりうる値は $+1$ と -1 だけであることがわかる．しかし $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ は t の連続関数であり，$t=0$ のとき1に等しいから，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}=1$ でなければならない．こうしておいて，関係 (89) を無限小演算子 $U(\mathrm{d}t,0)=1-(\mathrm{i}/\hbar)H\mathrm{d}t$ に適用すれば，

$$1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\mathrm{d}t=K\left[1+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\mathrm{d}t\right]K^\dagger,$$

すなわち

$$KHK^\dagger=H \tag{90}$$

が得られる．

要約すると，保存系の変化の法則が時間に関して可逆であるならば，ハミルトニアンは実であり，逆も成り立つ（逆は§17で証明されている）．

可逆性の要請は，ふつう微視的可逆性の原理という名のもとに，上に採用した形といくらか違ったつぎの形に定式化されている．

系は保存系であるとし，これが時刻 t_0 においてある状態 $|\varphi\rangle$ に準備されているとき，時刻 t においてある状態 $|\chi\rangle$ に見いだされる確率を w とする．また，時刻 t_0 において状態 $K|\chi\rangle$ に準備されているとき，時刻 t において状態 $K|\varphi\rangle$ に見いだされる確率を $w_{\mathrm{ren.}}$ とする．微視的可逆性の原理は，任意の $|\varphi\rangle, |\chi\rangle, t_0$ および t に対して

$$w_{\mathrm{ren.}}=w \tag{91}$$

であることを要求する．

条件 (91) は

$$|(\langle\varphi|K^\dagger)(U(t,t_0)K|\chi\rangle)|^2=|\langle\chi|U(t,t_0)|\varphi\rangle|^2$$

と書かれる．この関係式は (58) と比較されよう．

$$(\langle\varphi|K^\dagger)(UK|\chi\rangle)=\langle\varphi|(K^\dagger UK)|\chi\rangle^*=\langle\chi|(K^\dagger U^\dagger K)|\varphi\rangle$$

であるから，上記の式 はまた

$$|\langle\chi|(K^\dagger U^\dagger K)|\varphi\rangle| = |\langle\chi|U|\varphi\rangle|$$

と書かれる．この関係式はどのような $|\varphi\rangle$ と $|\chi\rangle$ についても満たされなければならないから，U と $K^\dagger U^\dagger K$ は位相因数を除いて等しい（定理II）．因数 $e^{i\alpha}$ に関して上に述べた議論を繰り返せば，この因数が必ず1に等しいことは容易に示される．それゆえ，微視的可逆性の原理は

$$\boxed{U(t, t_0) = K^\dagger U^\dagger(t, t_0) K} \tag{92}$$

であることを要求し，これを無限小の時間的変化の演算子に適用すれば，ハミルトニアンの不変条件（90）がもう一度得られる([16])．

外部の場のないところで変化する量子系はすべて微視的可逆性の原理を満たすということをわれわれは多くの場合承認する．現在までのところ，この仮定を破る実験的事実は一つもない．外部の場があるときは，この場が時間反転によって不変であるか不変でないかによって，この原理は満たされるかまたは満たされない．静電場はこのような不変性をもつ場の一つである．静電場の原因は動かない電荷であり，その統計的分布は時間反転によって変わらないから，このことは容易に理解される．これに反して，静磁場の原因は継続的な電流であり，時間反転によって電流の向きが変わるから，この電流によって生じる磁場も反転する．それゆえ，たとえ静的なものにせよ磁場が存在するときは，微視的可逆性の原理は満たされない．

§ 21.　結果：クラーマースの縮退

他のすべての対称性と同じように，H が実であるという事実も，その固有値問題がもついくつかの注目すべき性質によって解釈される．

$|u\rangle$ が H の固有ベクトルで，

$$H|u\rangle = E|u\rangle$$

ならば，その複素共役 $K|u\rangle$ もまた H の固有ベクトルであり，同じ固有値 E に対応する．実際，仮定

$$HK = KH$$

と，E が実数であることを使えば，

$$H(K|u\rangle) = K(H|u\rangle) = (KE|u\rangle) = E(K|u\rangle).$$

その結果，固有値 E の部分空間 $\mathcal{E}_E$ は反ユニタリ変換 K によって不変である．それゆ

([16]) $U^\dagger(t_2, t_1) = U(t_1, t_2)$ であるから，(92) はまたつぎのように書かれる．

$$U(t_2, t_1) = K^\dagger U(t_1, t_2) K.$$

え，この場合にも §19 の結果が適用される．この際，K^2 が $+1$ に等しいか -1 に等しいかによって二つの場合を区別することが必要である．

第1の場合．$K^2 = +1$（偶数個の 1/2 スピン）．

各部分空間 $\mathcal{E}_E$ のなかに，実のベクトルばかりから成る直交規格化基底を選ぶことができる．それゆえ H は実のベクトルばかりから成る基底系を（少なくとも一つ）もつ．

第2の場合．$K^2 = -1$（奇数個の 1/2 スピン）．

各部分空間 $\mathcal{E}_E$ のなかに，二つずつ複素共役になっているベクトルばかりから成る直交規格化基底を選ぶことができる．それゆえ，部分空間 $\mathcal{E}_E$ は偶数次元をもつ．Hの各固有値は少なくとも二重に縮退し，縮退の位数は必ず偶数である．この型の縮退は**クラーマースの縮退**と呼ばれる．

ある種の系は時間反転による不変性以外に対称性をもたない．非対称結晶格子のなかに置かれた原子の場合にはこのことが起こる．このような原子は純粋に静電的な外部の場にしたがう系として取り扱うことができ，そのハミルトニアンは実である．この原子が奇数個の電子を含むときには，その準位がすべて二重に縮退する．この型の縮退は磁場が導入されたとき消失する．

§ 22.　回転によって不変な実のハミルトニアン

ハミルトニアン H が時間反転による不変性のほかにも対称性をもつときには，前の §21 の結果は成り立つけれども，多くの興味は失われる．ウィグナー(17)はつぎの仮定のもとに H の性質を系統的に研究している．

i）　H は実である：$[K, H] = 0$,

ii）　H はある線形変換群に属する変換 T_i によって不変である：$[T_i, H] = 0$,

iii）　これらの変換 T_i は時間反転と交換する：$[K, T_i] = 0$.

ここでは不変群が回転群である場合に限定する(18)．

---

(17) E. P. Wigner, *Göttinger Nachrichten*, **31** (1932), 546.

(18) G を任意の群とするとき，H が実であるということの結果として，《G 縮退》が2倍されるか，または H を対角化する表現を適当に選んで，その基底ベクトルがある《実》の条件を満たすようにできる．実際，つぎの結果が得られている (Wigner，前掲論文を参照)．

G の既約表現を $\mathsf{G}^{(j)}$ とし，その共役表現を $\mathsf{G}^{(j)*}$ とする．これらの表現のうちの一方に属するベクトルに K を作用させると，他方に属するベクトルが得られる．$\mathsf{G}^{(j)}$ と $\mathsf{G}^{(j)*}$ は場合により同値あるいは非同値である．同値の場合には，一方を他方に移すユニタリ行列 S ($\mathsf{G}^{(j)*} = S\mathsf{G}^{(j)}S^\dagger$) が $SS^* = \pm 1$ という性質をもつ．さてつぎに，H の固有値の一つに対する部分空間において定められる群 G の（場↗

y 軸のまわりの角 π の回転を表わす演算子を Y とする（さきに導入した $Y^{(S)}$，すなわちスピンだけの回転を表わす演算子と混同しないように）．

$$K_y \equiv Y^{\dagger}K \equiv e^{i\pi J_y/\hbar}K \tag{93}$$

と置けば，$Y^{\dagger}$ および K は J^2 と交換し J_z と反交換する．したがって K_y は J^2 および J_z と交換する．これはまた J_+ および J_- とも交換する．実際，

$$Y^{\dagger}K(J_x \pm iJ_y) = Y^{\dagger}(-J_x \pm iJ_y)K = (J_x \pm iJ_y)Y^{\dagger}K.$$

さらに，$[Y, K] = 0$ で $Y^2 = K^2 = (-)^n$（(88) を参照）であるから，

$$K_y^2 = 1 \tag{94}$$

を得る．

反ユニタリ変換 K_y をある複素共役と同一視できることは，§19 で K に対して行なったのと同様である．両者を区別する必要があるから，今の新しい型の共役を示すために引用符《》を用いる．したがって K_y と交換する（線形）演算子はすべて《実》であるという．ベクトル $|\ \rangle$ の《複素共役》は定義によりベクトル $K_y|\ \rangle$ である．$K_y^2 = 1$ であるから，《実》のベクトル，《実》の表現が存在する．《実》のベクトルに《実》の演算子が作用すれば《実》のベクトルが生じる．《実》の表現においては，《実》の演算子は実行列によって表わされる．

J^2 および J_z は《実》であるから，角運動量 $(j\ j)$ の空間のなかに，《実》ベクトルばかりから成る基底系をつくることができる(*)．J_+ と J_- も《実》であるから，これらのベクトルから出発して第13章，§6 の方法により標準基底をつくれば，この基底は《実》ベクトルばかりから成る．

《実》の標準基底をつくるベクトルを $|\tau\ j\ \mu\rangle$ で表わす．H が回転によっても時間反転によっても不変であるとき，それは J とも K_y とも交換する．表現 $\{\tau\ j\ \mu\}$ において H を表わす行列は (52) の形の実行列である．言いかえれば，

$$\langle\tau\ j\ \mu|H|\tau' j' \mu'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}H^{(j)}_{\tau\tau'}$$

であり，$H^{(j)}_{\tau\tau'}$ はすべて実数である．したがって，H は回転の縮退を示し，その上《実》の

↘ 合によっては可約な）表現を G で表わす．ここでつぎの三つの場合が生じうる．

a)　$G^{(j)*}$ が $G^{(j)}$ に非同値であるとき，これら二つの表現は G の既約分解のなかに同じ回数だけ現われる（2倍の縮退）．

b)　$G^{(j)*} \simeq G^{(j)}$ で $SS^*K^2 = -1$ のとき，$G^{(j)}$ は G の分解のなかに偶数回現われる（2倍の縮退）．

c)　$G^{(j)*} \simeq G^{(j)}$ で $SS^*K^2 = +1$ のとき，G の各成分 $G^{(j)}$ の基底ベクトルは《実》の条件 $KS|u\rangle = |u\rangle$ にしたがう．

回転群の表現はすべて c) の場合に対応する．

(*)［訳注］角運動量が $(j\ j)$ のベクトルとは，J^2 の固有値が $j(j+1)$，J_z の固有値が j であるような角運動量の固有ベクトル（第13章参照）．

標準基底を構成する固有ベクトルの直交規格化系を（少なくとも一つ）もつ．

状態空間 $\mathcal{E}$ のなかに《実》の底をつくるには，もっと簡単な空間の基底ベクトルのテンソル積をとるのが普通の方法である．

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \cdots$$

とし，各部分空間 $\mathcal{E}_i$ のなかに回転演算子と時間反転演算子が定められているとする．各 $\mathcal{E}_i$ には《複素共役》の演算子 $K_y^{(i)} = Y^{(i)\dagger} K^{(i)}$ が結びつけられ，全空間の演算子 K_y はこれらのテンソル積

$$K_y = K_y^{(1)} K_y^{(2)} \cdots$$

である．

《実》ベクトルのテンソル積は《実》のベクトルである．特に，各部分空間において角運動量の《実》標準基底をつくるベクトルを選び，それらのテンソル積をとれば，$\mathcal{E}$ における《実》の基底ベクトル系がつくられる．このような $\mathcal{E}$ の基底系から出発して，角運動量の合成により，この空間における全角運動量の標準基底をつくることができる．クレブシュ=ゴーダン係数はすべて実であるから，こうして得られた標準基底は《実》のベクトルばかりから成る．

終りにあたって，球面調和関数がもつ《実》の性格について一つの注意を述べておく．

一つの粒子の位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ の角座標を $\omega = (\theta, \varphi)$ とし，この粒子が角運動量 $(\boldsymbol{l\ m})$ をもつ状態を表わす球面調和関数を $Y_l^m(\omega)$ とする．この特殊な場合には $(\hbar = 1)$

$$K_y = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi l_y} K_0$$

であり，これから（付録B (92) および付録C (62)）

$$K_y Y_l^m(\omega) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi l_y} Y_l^{m*}(\omega) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi l_y} (-)^m Y_l^{-m}(\omega) = (-)^l Y_l^m(\omega).$$

それゆえ球面調和関数 Y_l^m は l が偶数のとき《実》であり，l が奇数のとき《純虚》である．他方，関数

$$\mathcal{Y}_l^m(\omega) \equiv \mathrm{i}^l Y_l^m(\omega)$$

は軌道角運動量の《実》標準基底をつくる．

いま，同じ粒子の運動量 $\boldsymbol{p}$ の方向を表わす角座標を $\omega_p \equiv (\theta_p, \varphi_p)$ とし，表現 $\{\boldsymbol{p}\}$ において角運動量 $(\boldsymbol{l\ m})$ をもつ状態を表わす球面調和関数を $Y_l^m(\omega_p)$ とする．このとき

$$K_0 = S_0 K_p$$

であることが示される（問題10）．ただし，S_0 は偶奇性演算子（式 (45)）であり，K_p は表現 $\{\boldsymbol{p}\}$ に結びついた複素共役演算子である．したがって

$$K_y Y_l^m(\omega_p) = Y_l^m(\omega_p)$$

が得られる．$Y_l^m(\omega_p)$ は軌道角運動量の《実》標準基底をつくる．

《実》の性格に関するこれらの考察は，一般の既約テンソル演算子にも容易に拡張され

る（問題12を参照）.

演 習 と 問 題

1.　一つの系の状態ベクトルの空間 $\mathcal{E}$ がいくつかの部分空間の和 $\mathcal{E}_1+\mathcal{E}_2+\cdots$ であり，これらの部分空間はこの系の物理的オブザーバブルの全体に関して不変であるとする．これらの部分空間への射影子 $P_1, P_2, \cdots$ はすべての物理的オブザーバブルと交換することを示せ．また $\mathcal{E}$ のベクトルのうちには，交換する物理的オブザーバブルの完全集合に共通な固有ベクトルであるという性質をもたないものがあることを示せ．

2.　性質（45）によって定められる演算子 S_0 は確かに関係（43）および（44），また特に関係 $S_0 \boldsymbol{p} S_0{}^{\dagger} = -\boldsymbol{p}$ を満たすことを示せ．

3.　スピン 1/2 の 1 粒子をベクトル $\boldsymbol{u}$ に垂直な平面に関して鏡映する演算子は，軌道変数だけに作用する演算子とスピン変数だけに作用する演算子との積である．位相因数を適当に選べば，後者は $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u})$ に等しいことを示せ．積 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u})$ はベクトル $\boldsymbol{u}$ と $\boldsymbol{v}$ にそれぞれ垂直な二平面に関する鏡映をつづけて行なうことを表わす．これは軸 $(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{v})/|\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{v}|$ のまわりに角 $2(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v})$ だけスピンを回転するときの演算子に等しい（本来の性質として位相を除いて等しい）ことを確かめよ．

4.　スピン s の粒子のビームが一つのポテンシャルにより散乱される．ポテンシャルは場合によりスピンに依存してもよい．入射運動量を $\boldsymbol{p}_i$ とする．一つのはっきり決まった方向に散乱される粒子を絞りによって選び出す．これらの粒子の運動量を $\boldsymbol{p}_f$ で表わし，散乱面すなわちベクトル $\boldsymbol{p}_i$ と $\boldsymbol{p}_f$ からつくられる平面を D で表わす．入射粒子〔のスピン〕には偏りがなく，したがってそのスピン状態は密度演算子 $\rho_i = 1/(2s+1)$ によって表わされると仮定する．相互作用ポテンシャルが原点に関する回転と反転によって不変であるとき，散乱粒子のスピン状態を表わす密度演算子 ρ_f は平面 D に関して対称であることを示せ．

5.　スピン 1/2 の粒子のスピン状態を表わす密度演算子は

$$\rho = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

の形でただ一通りに表わされることを示せ．ただし，$\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ はこの粒子のスピンベクトルの 2 倍であり，$\boldsymbol{P}$ は長さが 0 と 1 とのあいだにあるベクトルで，この粒子の偏りの状態を完全に定めるものである．

問題 4 にもどって $s = 1/2$ と仮定すれば，散乱粒子の偏りを定めるベクトル $\boldsymbol{P}_f$ が散乱面に垂直であることを示せ．

6.　一つの系のハミルトニアンにどのような時刻の実関数を付け加えても，変化の演算子には単に一つの位相因数が掛けられるだけであることを示せ．

7.　ガリレイの時空座標変換によって，一粒子の変数 $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{s}$ はそれぞれ $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t, \boldsymbol{p}-m\boldsymbol{v}, \boldsymbol{s}$ に変換される．このような変換は演算子 $G(\boldsymbol{v}, t) = \exp[\mathrm{i}\boldsymbol{v}\cdot(m\boldsymbol{r}-\boldsymbol{p}t)/\hbar]$ によって表わされることを示せ．同じ変換を N 粒子系に適用した場合には，変換は演算子 $G(\boldsymbol{v}, t) = \exp[\mathrm{i}\boldsymbol{v}\cdot(M\boldsymbol{R}-\boldsymbol{P}t)/\hbar]$ で表わされる．ただし $M, \boldsymbol{R}, \boldsymbol{P}$ はそれぞれ重心の質量，位置，

運動量である．

［注意；与えられた t の値に対して，ガリレイ変換の全体は群をつくる．またここで採用した位相の選び方によれば，変換演算子の全体も群をつくる．］変化の法則がこの変換によって不変であるのは，

$$G^{\dagger}(v,t)U(t,t_0)G(v,t_0)=U(t,t_0)\times(\text{位相因数})$$

となるときである．この条件は《シュレーディンガー方程式に関するガリレイ不変の条件》

$$G^{\dagger}(v,t)\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right]G(v,t)=\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right]+f$$

に同値であることを示せ．ただし f は時刻の実関数で任意にとりうる．また，この条件はシュレーディンガーのハミルトニアンによって実際に満たされることを示せ（このとき $f=0$ となる）．

8. 並進，回転の演算子および反転演算子 S_0（定義 (45)）は，時間反転を表わす演算子 K と交換することを示せ，またこの性質は K を定めるときに入ってくる任意の位相の選び方によらないことを示せ．

9. 反ユニタリ演算子の二乗が定数に等しいとき，この定数は $+1$ または -1 以外にないことを示せ．

10. 表現 $\{p\}$ に結びついた複素共役演算子を K_p，表現 $\{r\}$ に結びつたい複素共役演算子を K_0，反転演算子（定義 (45)）を S_0 とする．$K_0=S_0K_p$ であることを示せ．このことから，時間反転によって波動関数 $\Phi(p)$ は

$$K\Phi(p)=\Phi^*(-p)$$

に変換されることを導け．

11. 一つの系のハミルトニアンが時間反転によって不変であるとし，この系の純虚なオブザーバブル（§19を参照）の一つ（運動量，スピン，軌道角運動量など）を B とする．つぎのことを示せ：

i）ある定常状態が縮退していないとき，この状態における B の平均値は0である．

ii）エネルギーの任意の固有値に対する部分空間に B を射影して得られる演算子の跡は0である．

12. 既約テンソル演算子 $\mathrm{T}^{(k)}$ の標準成分を $T_q^{(k)}\ (q=-k,-k+1,\cdots,+k)$ で表わす．$\mathrm{T}^{(k)}$ の複素共役もテンソル演算子であって，その $q=0$ 成分は $T_0^{(k)}$ の時間反転による変換であると定義する（この定義によれば，実ベクトル演算子のデカルト成分は時間反転によって不変であり，純虚ベクトル演算子のそれは符号を変える）．$\mathrm{T}^{(k)}$ の複素共役の標準成分は，$(-)^k\mathrm{T}^{(k)}$ の対応する成分の（§22の意味における）《複素共役》演算子であることを示せ．また，特に《実》標準表現においては，$\mathrm{i}^k\mathrm{T}^{(k)}$ が実であるときに行列要素 $\langle\tau j\mu|T_q^{(k)}|\tau'j'\mu'\rangle$ は実であり，$\mathrm{i}^k\mathrm{T}^{(k)}$ が純虚のとき行列要素も純虚であることを示せ．

［注意；この性質は角相関問題に直接適用される．これによっていろいろな多重極の寄与の相対的な位相が符号を除いて与えられるからである］．

付録 B

特殊関数とそれに関連した公式

目　次

I．ラプラスの方程式．ラゲールの多項式．クーロン関数

§1．ラプラスの方程式と合流型超幾何級数

ラプラスの方程式

$$\left[z\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}+(\beta-z)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}-\alpha\right]f(z)=0 \qquad (\alpha,\beta\ \text{は任意の複素定数}). \tag{1}$$

合流型超幾何級数 $F(\alpha|\beta|z)$．定義によれば

$$F(\alpha|\beta|z)=1+\frac{\alpha}{\beta}\cdot\frac{z}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\cdot\frac{z^2}{2!}+\cdots=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(\alpha+n)\,\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)\,\Gamma(\beta+n)}\cdot\frac{z^n}{n!}. \tag{2}$$

この級数は，

i）$\beta\neq-p$（pは整数 $\geqslant 0$）である限り，どのようなαとβに対してもはっきり定義される．

ii）複素数zの全平面において収束する．

iii）$\alpha=-p$（pは整数 $\geqslant 0$）のときp次の多項式であり，$\alpha\neq-p$ のとき無限遠において真性特異点をもつ．

iv）クンマーの関係式

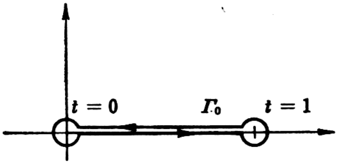
$$F(\alpha|\beta|z)=\mathrm{e}^zF(\beta-\alpha|\beta|-z) \tag{3}$$

を満たす．

関数

$$F(\alpha|\beta|z) \qquad \text{と} \qquad z^{1-\beta}F(\alpha-\beta+1|2-\beta|z)$$

が存在するとき[1]，これらは方程式（1）の解である．



B·1 a 図

積分形式の解（ラプラスの方法）：
複素t平面上の曲線Γの両端において

$$t^{\alpha}(1-t)^{\beta-\alpha}\,\mathrm{e}^{zt}$$

が同じ値をとるとき，積分

$$\int_{\Gamma}\mathrm{e}^{zt}\,t^{\alpha-1}(1-t)^{\beta-\alpha-1}\,\mathrm{d}t \tag{4}$$

は方程式（1）の特殊解である．

これからは

$$\alpha\ \text{は整数でなく}, \qquad \beta=b\ (b\ \text{は整数}>0)$$

---

(1) βが整数でないとき，これら二つの関数は存在し，互いに異なる．$\beta=1$ のとき，これらは互いに等しい．$\beta=0,-1,-2,\cdots$ のとき，関数 $z^{1-\beta}F(\alpha-\beta+1|2-\beta|z)$ だけが存在する．$\beta=2,3,\cdots$ のときには，関数 $F(\alpha|\beta|z)$ だけが存在する．

と仮定する．

点 $t=0$ と $t=1$ を囲む閉曲線 Γ_0 (B•1 a 図)(2) に対して，(4) 型の解が一つ定まる［実軸上の2点，0と1のあいだにある Γ_0 の部分では，t の増加する方向に進むとき，$\arg t - \arg(1-t) = 0$ であると規約しておく］．この解は z の整関数であり，$F(\alpha|\beta|z)$ に比例する．比例定数を求めるには，積分記号 $\int$ のなかの e^{zt} を展開し，公式

$$B(x, y) \equiv \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} = (1-e^{2\pi i y})^{-1}\int_{\Gamma_0} t^{x-1}(1-t)^{y-1}\,dt \qquad (5)$$

$$(x+y = \text{整数},\ y \neq \text{整数})$$

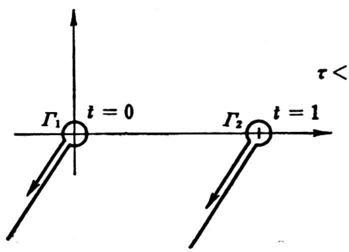
を利用する．その結果，

$$F(\alpha|b|z) = (1-e^{-2\pi i\alpha})^{-1}\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(b-\alpha)}\int_{\Gamma_0} e^{zt}t^{\alpha-1}(1-t)^{b-\alpha-1}\,dt. \qquad (6)$$

$t=0$ だけを囲む曲線と $t=1$ だけを囲む曲線をそれぞれ Γ_1, Γ_2 とすれば (B•1 b 図)(3)，これらに対応するのは原点で特異な二つの(4)型の解である．それらは

$$W_r(\alpha|b|z) = (1-e^{-2\pi i\alpha})^{-1}\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(b-\alpha)}$$

$$\times\int_{\Gamma_r} e^{zt}t^{\alpha-1}(1-t)^{b-\alpha-1}\,dt \quad (r = 1, 2). \qquad (7)$$



B•1 b 図

積分の収束条件は

$$\frac{\pi}{2} < \arg z + \tau + 2n\pi < \frac{3\pi}{2}$$

(τ は曲線 Γ_1, Γ_2 の無限遠点における偏角)．

便宜上つぎのように規約する(4)．

$$-\pi < \arg z < +\pi, \qquad -\pi < \tau < +\pi, \qquad \operatorname{sign}\tau = \operatorname{sign}(\arg z).$$

曲線 Γ_1 の終点と曲線 Γ_2 の始点において，

$$\arg t = \tau.$$

曲線 Γ_1 の終点と曲線 Γ_2 の始点において，

$$\arg(1-t) = \begin{cases} \tau - \pi & (0 < \tau < \pi \text{ のとき}) \\ \tau + \pi & (-\pi < \tau < 0 \text{ のとき}). \end{cases}$$

これらの規約のもとに，

---

(2) Γ_0 は正の向きにまわるものとする．

(3) Γ_1 と Γ_2 は正の向きにまわる．

(4) この規約においては $\mathrm{Im}\,z \neq 0$ と仮定している．実軸の上で W_1 と W_2 を定めるには，解析接続を行なう必要がある．その結果得られる関数は，$\mathrm{Im}\,z \to +0$ であるか $\mathrm{Im}\,z \to -0$ であるかによって違ってくる．

$$W_1(b-\alpha|b|-z) = e^{-z} W_2(\alpha|b|z) \tag{8a}$$

$$W_2(b-\alpha|b|-z) = e^{-z} W_1(\alpha|b|z) \tag{8b}$$

$$(-\pi < \arg z < +\pi\,;\ -\pi < \arg(-z) < +\pi)$$

$$F(\alpha|b|z) = W_1(\alpha|b|z) + W_2(\alpha|b|z). \tag{9}$$

解 W_1 と W_2 の漸近展開（鞍点法によって定められる）．

$$W_1(\alpha|b|z) \underset{|z|\to\infty}{\sim} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-\alpha)}(-z)^{-\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{\Gamma(n+\alpha-b+1)}{\Gamma(\alpha-b+1)} \frac{(-z)^{-n}}{n!} \tag{10}$$

$$(-\pi < \arg(-z) < +\pi)$$

$$W_2(\alpha|b|z) \underset{|z|\to\infty}{\sim} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-b} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1-\alpha)}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\Gamma(n+b-\alpha)}{\Gamma(b-\alpha)} \frac{z^{-n}}{n!} \tag{11}$$

$$(-\pi < \arg z < +\pi).$$

§ 2.　ラゲールの多項式

定義[5]：

$$L_p^0 = e^z \frac{d^p}{dz^p}(e^{-z} z^p), \qquad L_p^k = (-)^k \frac{d^k}{dz^k} L_{p+k}^0 \quad (k, p = 0, 1, 2, \cdots, \infty) \tag{12}$$

L_p^k は p 次の多項式で，0 と $+\infty$ とのあいだに p 個の零点をもつ．

$$L_p^k(z) = \frac{[(p+k)!]^2}{p!\,k!} F(-p|k+1|z) = \sum_{s=0}^{p} (-)^s \frac{[(p+k)!]^2}{(p-s)!\,(k+s)!\,s!} z^s \tag{13}$$

特に $L_0^k = k!$

（ラプラスの）微分方程式

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2} + (k+1-z)\frac{d}{dz} + p\right] L_p^k = 0. \tag{14}$$

母関数

$$\frac{e^{-zt/(1-t)}}{(1-t)^{k+1}} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{t^p}{(p+k)!} L_p^k(z) \qquad (|t| < 1). \tag{15}$$

《直交規格化》関係

$$\int_0^\infty e^{-z} z^k L_p^k L_q^k \, dz = \frac{[(p+k)!]^3}{p!} \delta_{pq}. \tag{16}$$

§ 3.　水素類似原子の固有関数（シュレーディンガー理論）

$$a = \frac{a_0}{Z} = \frac{\hbar^2}{Zm'e^2} \qquad (a_0 \simeq \text{ボーア軌道の半径})$$

Ze は核の電荷，m' は電子の換算質量．

---

(5)　本によっては L_p^k で表わされている多項式は，われわれの記号で $(-)^k L_{p-k}^k$ に等しい．

エネルギーの固有値

$$E_n = -\left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{m'c^2}{2n^2} = -\frac{1}{n^2}\frac{Ze^2}{2a}.$$

球面座標において1に規格化された固有関数

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = a^{-3/2} N_{nl} F_{nl}\left(\frac{2r}{na}\right) Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{17}$$

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \tag{17 a}$$

$$F_{nl}(x) = x^l \mathrm{e}^{-x/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \tag{17 b}$$

$$(n = 1, 2, \cdots, \infty;\ l = 0, 1, \cdots, n-1;\ m = -l, -l+1, \cdots, l).$$

r の累乗の平均値

同じ固有状態 (nlm) に関する平均値のあいだの漸化式

$$\frac{s+1}{n^2}\langle r^s\rangle - (2s+1)a\langle r^{s-1}\rangle + \frac{s}{4}[(2l+1)^2 - s^2]a^2\langle r^{s-2}\rangle = 0 \quad (s > -2l-1)$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle = \frac{1}{n^2 a}; \qquad \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle = \frac{2}{(2l+1)n^3a^2}$$

$$\langle r\rangle = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]a; \qquad \langle r^2\rangle = \frac{1}{2}[5n^2+1-3l(l+1)]n^2a^2.$$

動径関数のうちはじめの数個の表

$$\rho = \frac{r}{a}, \qquad g_{nl}(\rho) = N_{nl}F_{nl}\left(\frac{2}{n}\rho\right)$$

$n = 1$　　$g_{1s} = 2\mathrm{e}^{-\rho}$

$n = 2$　　$g_{2s} = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(1 - \frac{1}{2}\rho\right)\mathrm{e}^{-\rho/2}, \qquad g_{2p} = \frac{\sqrt{6}}{12}\rho\,\mathrm{e}^{-\rho/2}$

$n = 3$　　$g_{3s} = \frac{2\sqrt{3}}{9}\left(1 - \frac{2}{3}\rho + \frac{2}{27}\rho^2\right)\mathrm{e}^{-\rho/3},$

$$g_{3p} = \frac{8\sqrt{6}}{27}\left(\rho - \frac{1}{6}\rho^2\right)\mathrm{e}^{-\rho/3}, \qquad g_{3d} = \frac{2\sqrt{30}}{955}\rho^3\mathrm{e}^{-\rho/3}.$$

§ 4. 純クーロン波

$\psi_c(r)$ は純クーロン・ポテンシャル $ZZ'e^2/r$ による1粒子の散乱波.

$$k = \frac{mv}{\hbar} = \text{波数}$$

$$v = \text{入射速度}$$

$$\gamma = \frac{ZZ'e^2}{\hbar v} \tag{18}$$

$$\psi_c = \mathrm{e}^{-\pi\gamma/2}\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}F(-\mathrm{i}\gamma|1|\mathrm{i}k(r-z)) \tag{19}$$

$$= \psi_i + \psi_d \tag{20}$$

$$\psi_i = e^{-\pi\gamma/2}\Gamma(1+i\gamma)e^{ikz}W_1(-i\gamma|1|ik(r-z)) \tag{21}$$

$$\psi_d = e^{-\pi\gamma/2}\Gamma(1+i\gamma)e^{ikz}W_2(-i\gamma|1|ik(r-z)). \tag{22}$$

漸近式

$$\psi_i \underset{k(r-z)\to\infty}{\sim} \exp[ikz+i\gamma\log k(r-z)]\left\{1+\frac{\gamma^2}{ik(r-z)}+\cdots\right\} \tag{23}$$

$$\psi_d \underset{k(r-z)\to\infty}{\sim} f_c(\theta)\frac{e^{i(kr-\gamma\log 2kr)}}{r}\left\{1+\frac{(1+i\gamma)^2}{ik(r-z)}+\cdots\right\} \tag{24}$$

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta}\exp\left[-i\gamma\log\left(\sin^2\frac{1}{2}\theta\right)+2i\sigma_0\right] \tag{25}$$

$$e^{2i\sigma_0} = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}. \tag{26}$$

原点における挙動

$$\psi_c(0) = e^{-\pi\gamma/2}\Gamma(1+i\gamma), \qquad |\psi_c(0)|^2 = \frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma}-1}. \tag{27}$$

§ 5. 球面クーロン関数

微分方程式

球面座標において，§4 の衝突問題は軌道角運動量の一つ一つの値 l に対して動径方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\gamma k}{r}\right)\right]y_l = 0 \tag{28}$$

を導き出す．

球面クーロン関数はこの方程式の特殊解である．これらは変数

$$\rho = kr$$

の関数である．これらはまた k と γ を媒介としてエネルギーに依存する．原点において (r^{l+1} のように) 正則な解 $F_l(\gamma;kr)$ と ($(1/r)^l$ のような特異性をもつ) 正則でない解 G_l, $u_l^{(+)}$, $u_l^{(-)}$ が定義される．

変数と関数の変換

$$z = -2i\rho, \qquad y_l = e^{i\rho}\rho^{l+1}v_l$$

により，方程式 (28) からラプラスの微分方程式

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2}+(2l+2-z)\frac{d}{dz}-(l+1+i\gamma)\right]v_l = 0$$

が得られる．これについては原点で正則な解 $F(l+1+i\gamma|2l+2|z)$ と二つの正則でない解 $W_{1,2}(l+1+i\gamma|2l+2|z)$ が知られている．

定義と相互の関係式

$$F_l(\gamma;\rho) = c_l e^{i\rho}\rho^{l+1}F(l+1+i\gamma|2l+2|-2i\rho) \tag{29 a}$$

$$= c_l e^{-i\rho}\rho^{l+1}F(l+1-i\gamma|2l+2|+2i\rho) \tag{29 b}$$

$$u_l^{(\pm)}(\gamma;\rho) = \pm 2i e^{\mp i\sigma_l} c_l e^{\pm i\rho}\rho^{l+1} W_1(l+1\pm i\gamma|2l+2|\mp 2i\rho) \tag{30 a}$$

$$= \pm 2i e^{\mp i\sigma_l} c_l e^{\mp i\rho}\rho^{l+1} W_2(l+1\mp i\gamma|2l+2|\pm 2i\rho) \tag{30 b}$$

$$G_l(\gamma;\rho) = \frac{1}{2}(u_l^{(+)}e^{i\sigma_l}+u_l^{(-)}e^{-i\sigma_l}). \tag{31}$$

c_l と σ_l（クーロンの位相のずれ）はつぎのような γ の関数である．

$$c_l = 2^l e^{-\pi\gamma/2}\frac{|\Gamma(l+1+i\gamma)|}{(2l+1)!}, \qquad \sigma_l = \arg\Gamma(l+1+i\gamma) \tag{32}$$

すなわち，

$l=0$ に対しては

$$c_0 = \left(\frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma}-1}\right)^{1/2}, \qquad \sigma_0 = \arg\Gamma(1+i\gamma) \tag{32 a}$$

$l\neq 0$ に対しては

$$c_l = c_0\frac{1}{(2l+1)!!}\times\prod_{s=1}^{l}\left(1+\frac{\gamma^2}{s^2}\right)^{1/2}, \qquad \sigma_l = \sigma_0+\sum_{s=1}^{l}\tan^{-1}\frac{\gamma}{s} \tag{32 b}$$

F_l と G_l は実であり，　$u_l^{(-)} = u_l^{(+)*}$

$$F_l = \frac{1}{2i}(u_l^{(+)}e^{i\sigma_l}-u_l^{(-)}e^{-i\sigma_l}) \tag{33}$$

$$u_l^{(\pm)} = e^{\mp i\sigma_l}(G_l\pm iF_l) \tag{34}$$

漸近式：$r\to\infty$ （$\rho\gg l(l+1)+\gamma^2$）

$$F_l \underset{\rho\to\infty}{\sim} \sin\left(\rho-\gamma\log 2\rho-\frac{1}{2}l\pi+\sigma_l\right) \tag{35}$$

$$G_l \underset{\rho\to\infty}{\sim} \cos\left(\rho-\gamma\log 2\rho-\frac{1}{2}l\pi+\sigma_l\right) \tag{36}$$

$$u_l^{(+)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \exp\left[i\left(\rho-\gamma\log 2\rho-\frac{1}{2}l\pi\right)\right] \quad \text{(出てゆく波)} \tag{37}$$

$$u_l^{(-)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \exp\left[-i\left(\rho-\gamma\log 2\rho-\frac{1}{2}l\pi\right)\right] \quad \text{(入ってくる波)}. \tag{38}$$

原点における挙動：$r\to 0$

$$F_l \underset{\rho\to 0}{\sim} c_l\rho^{l+1}\left[1+\frac{\gamma}{l+1}\rho+\cdots\right] \tag{39}$$

$$G_l \underset{\rho\to 0}{\sim} \frac{1}{(2l+1)c_l}\rho^{-l}\left[1+\begin{cases} O(\gamma\rho\log\rho) & (l=0\ \text{のとき}) \\ O\left(\frac{\gamma}{l}\rho\right) & (l\neq 0\ \text{のとき}) \end{cases}\right]. \tag{40}$$

F_l の一般的な動き

ρ が0から ∞ まで増加するとき，関数 F_l は初め ρ^{l+1} のように増加するが，その増し方はだんだん速くなり（指数関数のような動き），

$$\rho = \gamma+\sqrt{\gamma^2+l(l+1)}$$

に至って変曲点をもつ．それ以後は限りなく振動し，極大値と極小値は漸近的にそれぞれ $+1$ と -1 に近づく．またこの振動の周期は漸近的に 2π に近づく．

漸化式

$$(2l+1)\left[\gamma+\frac{l(l+1)}{\rho}\right]F_l = l\sqrt{\gamma^2+(l+1)^2}\,F_{l+1}+(l+1)\sqrt{\gamma^2+l^2}\,F_{l-1}\quad (l\neq 0)\tag{41}$$

$$\left(1+\frac{\gamma^2}{l^2}\right)^{1/2}F_{l-1} = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{l}{\rho}+\frac{\gamma}{l}\right)F_l\qquad (l\neq 0)\tag{42}$$

$$\left(1+\frac{\gamma^2}{l^2}\right)^{1/2}F_l = \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{l}{\rho}+\frac{\gamma}{l}\right)F_{l-1}.\qquad (l\neq 0)\tag{43}$$

これらの関係は F_l を $U_l\equiv aF_l+bG_l$ に置き換えてもそのまま成り立つ（a, b は任意に定められるが，l に無関係な係数である）．

ロンスキアンの関係式

$$G_l\frac{\mathrm{d}F_l}{\mathrm{d}\rho}-F_l\frac{\mathrm{d}G_l}{\mathrm{d}\rho} = 1.\tag{44}$$

これから（$l\neq 0$）：

$$G_lF_{l-1}-F_lG_{l-1} = \frac{1}{\sqrt{l^2+\gamma^2}}.\tag{45}$$

$\gamma=0$ のとき因数 ρ を除けば球ベッセル関数が得られる．

$$\begin{aligned} F_l(0;\rho) &= \rho\, j_l(\rho), & G_l(0;\rho) &= \rho\, n_l(\rho),\\ u_l^{(+)}(0;\rho) &= \rho\, h_l^{(+)}(\rho), & u_l^{(-)}(0;\rho) &= \rho\, h_l^{(-)}(\rho)\end{aligned}\tag{46}$$

（$j_l, n_l, h_l^{(\pm)}$ の定義についてはつぎの節を参照）．

II．球ベッセル関数

§6.　球ベッセル関数

微分方程式

自由粒子のシュレーディンガー方程式を極座標で表わせば，軌道角運動量の一つ一つの値 l に対して，つぎの動径方程式が導かれる[6]．

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\rho+1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]f_l \equiv \left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]f_l = 0.\tag{47}$$

---

(6)　$\gamma=0$ の特殊な場合には，$\rho=kr$，$y_l=krf_l(kr)$ と置けば，動径方程式（28）が得られる．

複素平面において，f_l は無限遠点に真性特異点をもち，また一般には $\rho=0$ において $(l+1)$ 位の極をもつ．

球ベッセル関数は，この方程式の特殊解である．原点で（r^l のように）正則な解として j_l（本来の球ベッセル関数），正則でない解として n_l（ノイマン関数），$h_l^{(+)}$（第1種ハンケル関数），$h_l^{(-)}$（第2種ハンケル関数）が定義される．

定義[7]

$$j_l(\rho)=\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2}J_{l+\frac{1}{2}}(\rho),\quad n_l(\rho)=(-)^l\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2}J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho),$$

$$h_l^{(\pm)}(\rho)=n_l(\rho)\pm\mathrm{i}\,j_l(\rho)$$

（J_ν は普通の ν 次のベッセル関数を表わす）．

$$j_l \text{ と } n_l \text{ は実であり，}\quad h_l^{(-)}=h_l^{(+)*}. \tag{48}$$

具体的な式

$$j_l=R_l\frac{\sin\rho}{\rho}+S_l\frac{\cos\rho}{\rho},\quad n_l=R_l\frac{\cos\rho}{\rho}-S_l\frac{\sin\rho}{\rho},\quad h_l^{(\pm)}=(R_l\pm\mathrm{i}S_l)\frac{e^{\pm\mathrm{i}\rho}}{\rho}. \tag{49}$$

R_l は $1/\rho$ の l 次実係数多項式で偶奇性は $(-)^l$；

S_l は $1/\rho$ の $(l-1)$ 次実係数多項式で偶奇性は $(-)^{l-1}$.

$$R_l+\mathrm{i}S_l=\sum_{s=0}^{l}\frac{\mathrm{i}^{s-l}}{2^s s!}\frac{(l+s)!}{(l-s)!}\rho^{-s} \tag{50}$$

$$j_0=\frac{\sin\rho}{\rho},\qquad n_0=\frac{\cos\rho}{\rho},\qquad h_0^{(\pm)}=\frac{e^{\pm\mathrm{i}\rho}}{\rho}$$

$$j_1=\frac{\sin\rho}{\rho^2}-\frac{\cos\rho}{\rho},\qquad n_1=\frac{\cos\rho}{\rho^2}+\frac{\sin\rho}{\rho},\qquad h_1^{(\pm)}=\left(\frac{1}{\rho^2}\mp\frac{\mathrm{i}}{\rho}\right)e^{\pm\mathrm{i}\rho}.$$

漸近式：$\rho\to\infty$　$(\rho\gg l(l+1))$

$$\begin{gathered}j_l\underset{\rho\to\infty}{\sim}\frac{1}{\rho}\sin\left(\rho-\frac{1}{2}l\pi\right),\qquad n_l\underset{\rho\to\infty}{\sim}\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho-\frac{1}{2}l\pi\right)\\ h_l^{(\pm)}\underset{\rho\to\infty}{\sim}\frac{1}{\rho}\exp\left(\pm\mathrm{i}\left(\rho-\frac{1}{2}l\pi\right)\right)\left[1\pm\mathrm{i}\frac{l(l+1)}{2\rho}-\cdots\right].\end{gathered} \tag{51}$$

原点における挙動：$\rho\to0$

$$\begin{gathered}j_l\underset{\rho\to0}{\sim}\frac{\rho^l}{(2l+1)!!}\left[1-\frac{\rho^2}{2(2l+3)}+\cdots\right]\\ n_l\underset{\rho\to0}{\sim}\frac{(2l+1)!!}{(2l+1)}\left(\frac{1}{\rho}\right)^{l+1}\left[1+\frac{\rho^2}{2(2l-1)}+\cdots\right].\end{gathered} \tag{52}$$

---

[7] 多くの書物では n_l によって同じ関数の符号を変えたものを表わし，また関数

$$h_l^{(1)}=-\mathrm{i}\,h_l^{(+)},\qquad h_l^{(2)}=\mathrm{i}\,h_l^{(-)}$$

を導入してそれぞれ第1種および第2種球ハンケル関数と名づける．

j_l の一般的な動き

ρ が 0 から $+\infty$ まで増加するとき，関数 ρj_l は初め ρ^{l+1} のように増加するが，その増し方はだんだん速くなり（指数関数のような動き），点 $\rho=\sqrt{l(l+1)}$ に至って変曲点をもつ．それ以後は限りなく振動し，極大値と極小値は漸近的にそれぞれ $+1$ と -1 に近づく．漸近式 (51) は $\rho \gg l(l+1)/2$ のとき良い近似である．しかし振幅は $\rho \gtrsim 2l$ のとき実際上漸近値に（10%の範囲で）到達する．

漸化式

以下，$f_l \equiv aj_l+bn_l$ とし，a と b は任意に定められるが l には無関係な係数とする．つぎの式が成り立つ ($l \neq 0$)：

$$(2l+1)f_l = \rho[f_{l+1}+f_{l-1}] \tag{53}$$

$$f_{l-1} = \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{l+1}{\rho}\right]f_l = \frac{1}{\rho^{l+1}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}(\rho^{l+1}f_l) \tag{54}$$

$$f_l = \left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{l-1}{\rho}\right]f_{l-1} = -\rho^{l-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\frac{f_{l-1}}{\rho^{l-1}}\right). \tag{55}$$

これから

$$f_l = \left[\rho^l\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)^l\right]f_0. \tag{56}$$

ロンスキアンの関係式

$$\rho^2\left[n_l\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}j_l\right)-j_l\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}n_l\right)\right] = 1. \tag{57}$$

これから ($l \neq 0$ のとき)

$$\rho^2[n_l j_{l-1}-j_l n_{l-1}] = 1. \tag{58}$$

III.　調和振動子とエルミート多項式

§ 7.　エルミート多項式

定義

$$H_n(z) = (-)^n \mathrm{e}^{z^2}\left(\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}z^n}\mathrm{e}^{-z^2}\right) \qquad (n=0,1,2,\cdots,\infty). \tag{59}$$

H_n は n 次の多項式で，偶奇性は $(-)^n$，n 個の零点をもつ．

$$H_n(z) = \begin{cases} (-)^p\dfrac{(2p)!}{p!}F\left(-p\left|\dfrac{1}{2}\right|z^2\right) & (n=2p\ \text{のとき}) \\ (-)^p 2\dfrac{(2p+1)!}{p!}zF\left(-p\left|\dfrac{3}{2}\right|z^2\right) & (n=2p+1\ \text{のとき}). \end{cases} \tag{60}$$

微分方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}-2z\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}+2n\right]H_n(z)=0. \tag{61}$$

母関数

$$\exp(-s^2+2sz)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}H_n(z). \tag{62}$$

漸化式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}H_n=2nH_{n-1} \tag{63}$$

$$\left(2z-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)H_n=H_{n-1} \tag{64}$$

$$2zH_n=H_{n+1}+2nH_{n-1}. \tag{65}$$

エルミート多項式のうち初めの6個の表

$$H_0=1,\qquad H_1=2z,\qquad H_2=4z^2-1,$$

$$H_3=8z^3-12z,\qquad H_4=16z^4-48z^2+12,\qquad H_5=32z^5-160z^3+120z.$$

§ 8. 調和振動子の固有関数

$u_n(Q)$ は固有値

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n=0,1,\cdots,\infty)$$

に対する固有関数を1に規格化したものである（位相は 関係 (68) が成り立ち $u_0(0)$ が正の実数となるように選ばれる）．

固有値方程式 $(Q=(m\omega/\hbar)^{1/2}q)$

$$\frac{1}{2}\left(Q^2-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}Q^2}\right)u_n(Q)=\left(n+\frac{1}{2}\right)u_n. \tag{66}$$

母関数

$$\pi^{-1/4}\mathrm{e}^{-Q^2/2}\mathrm{e}^{-t^2/2+\sqrt{2}Qt}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{\sqrt{n!}}u_n(Q). \tag{67}$$

直交規格化関係と完全性関係

$$\int_{-\infty}^{+\infty}u_nu_p\,\mathrm{d}Q=\delta_{np},\qquad \sum_{n=0}^{\infty}u_n^*(Q)\,u_n(Q')=\delta(Q-Q').$$

漸化式

$$\left.\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)u_n&=\sqrt{n}\,u_{n-1}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)u_n&=\sqrt{n+1}\,u_{n+1}\end{aligned}\right\} \tag{68}$$

$$Qu_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}u_{n+1}+\sqrt{\frac{n}{2}}u_{n-1}. \tag{69}$$

偶奇性 $(-)^n$：

$$u_n(-Q) = (-)^n u_n(Q).$$

エルミート多項式の関数として表わす：

$$u_n = (\sqrt{\pi}\,2^n n!)^{-1/2}\mathrm{e}^{-Q^2/2}H_n(Q). \tag{70}$$

IV. ルジャンドルの関数と多項式．球面調和関数

§ 9. ルジャンドルの多項式と関数

定義

ルジャンドルの多項式 P_l $(l = 0, 1, 2, \cdots, \infty)$：

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}u^l}(u^2-1)^l. \tag{71}$$

P_l は l 次の多項式で，偶奇性は $(-)^l$，区間 $(-1, +1)$ に l 個の零点をもつ．

ルジャンドルの関数 P_l^m $(l = 0, 1, 2, \cdots, \infty;\ m = 0, 1, 2, \cdots, l)$：

$$P_l^m(u) = (1-u^2)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}u^m}P_l(u) = \frac{(1-u^2)^{m/2}}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}u^{l+m}}(u^2-1)^l \tag{72}$$
$$(-1 \leqq u \leqq 1).$$

$P_l^m(u)$ は $(1-u^2)^{m/2}$ と一つの多項式の積で，この多項式の次数は $(l-m)$，偶奇性は $(-)^{l-m}$，また区間 $(-1, +1)$ に $(l-m)$ 個の零点をもつ．特に

$$\begin{aligned} m = l \qquad & P_l^l = (2l-1)!!\,(1-u^2)^{l/2} \\ m = 0 \qquad & P_l^0 = P_l(u). \end{aligned} \tag{73}$$

$P_l(u)$ はルジャンドルの関数の特殊な場合である．

微分方程式

$$\left[(1-u^2)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}u^2}-2u\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}+l(l+1)-\frac{m^2}{1-u^2}\right]P_l^m = 0. \tag{74}$$

母関数

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tu+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty}t^l P_l(u) \qquad (|t| < 1) \tag{75}$$

$$(2m-1)!!\,(1-u^2)^{m/2}\frac{t^m}{[1-2tu+t^2]^{m+1/2}} = \sum_{l=m}^{\infty}t^l P_l^m(u) \quad (|t| < 1). \tag{76}$$

直交規格化関係

$$\int_{-1}^{+1} P_k^m P_l^m \,\mathrm{d}u = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{kl}. \tag{77}$$

漸化式

$$(2l+1)uP_l^m = (l+1-m)P_{l+1}^m + (l+m)P_{l-1}^m \tag{78}$$

$$(1-u^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}P_l^m = -luP_l^m + (l+m)P_{l-1}^m \tag{79}$$

$$= (l+1)uP_l^m - (l+1-m)P_{l+1}^m \tag{80}$$

($P_{-1} = 0$ と規約すれば，これらの関係は $l = 0$ のときにも成り立つ).

特殊な値

$$P_l(1) = 1, \qquad P_l(-1) = (-)^l$$

$$m \neq 0 \quad \text{ならば} \quad P_l^m(1) = P_l^m(-1) = 0 \tag{81}$$

$$P_l^m(0) = \begin{cases} (-)^p \dfrac{(2p+2m)!}{2^l p!\,(p+m)!} & (l-m = 2p \text{ のとき}) \\ 0 & (l-m = 2p+1 \text{ のとき}). \end{cases}$$

ルジャンドルの多項式のうち初めの 5 個の表

$$P_0 = 1, \qquad P_1 = u, \qquad P_2 = \frac{1}{2}(3u^2-1),$$

$$P_3 = \frac{1}{2}(5u^3-3u), \qquad P_4 = \frac{1}{8}(35u^4-30u^2+3).$$

§ 10. 球面調和関数

極座標における演算子 L_x, L_y, L_z

L_x, L_y, L_z はエルミート微分演算子で，($\hbar = 1$ となるように単位を定めた系では)

$$\boldsymbol{L} \equiv \frac{1}{\mathrm{i}}(\boldsymbol{r} \times \nabla)$$

によって定義される.

Oz を極座標の軸にとり，$\boldsymbol{r}$ の極座標を (r, θ, φ) とする. $\Omega \equiv (\theta, \varphi)$ によって二つの角座標の組を表わす ($\varphi = 0$ は平面 zOx, $\varphi = \pi/2$ は平面 zOy). 立体角の要素は

$$\mathrm{d}\Omega = \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi.$$

極座標によれば,

$$L_z = \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{82}$$

$$L_\pm \equiv L_x \pm \mathrm{i}L_y = \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] \tag{83}$$

$$\boldsymbol{L}^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{84}$$

球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ の定義：

演算子 $\boldsymbol{L}^2$ と L_z に共通の固有関数であり，

$$\boldsymbol{L}^2 Y_l^m = l(l+1)Y_l^m \tag{85}$$

$$L_z Y_l^m = mY_l^m \tag{86}$$

$$(l=0,1,2,\cdots,\infty\,;\ m=-l,-l+1,\cdots,l).$$

これらを完全に定めるためにつぎの規約を設ける：

a)　Y_l^m は半径1の球面上で1に規格化される．

b)　位相は漸化関係式 (89) が満たされ，$Y_l^0(0,0)$ が正の実数となるようにとる．

直交規格化関係と完全性関係

$$\int Y_l^{m*}Y_{l'}^{m'}\,\mathrm{d}\Omega \equiv \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\, Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\,Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi) = \delta_{mm'}\delta_{ll'} \tag{87}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\,Y_l^m(\theta',\varphi') = \frac{\delta(\theta-\theta')\,\delta(\varphi-\varphi')}{\sin\theta} \equiv \delta(\Omega-\Omega'). \tag{88}$$

Y_l^m は半径1の球面上で二乗積分可能な関数のなかで，完全直交規格化系をつくる．

漸化式

$$L_\pm Y_l^m = [l(l+1)-m(m\pm1)]^{1/2}Y_l^{m\pm1} = [(l\mp m)(l+1\pm m)]^{1/2}Y_l^{m\pm1} \tag{89}$$

$$\cos\theta\, Y_l^m = \left[\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{1/2}Y_{l+1}^m + \left[\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}\right]^{1/2}Y_{l-1}^m. \tag{90}$$

偶奇性 $(-)^l$

空間の反転 $(\theta,\varphi)\to(\pi-\theta,\varphi+\pi)$ によって，

$$Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) = (-)^l Y_l^m(\theta,\varphi). \tag{91}$$

複素共役

$$Y_l^{m*}(\theta,\varphi) = (-)^m Y_l^{-m}(\theta,\varphi). \tag{92}$$

ルジャンドルの関数との関係 $(m\geqslant 0)$

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-)^m\left[\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2}P_l^m(\cos\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}. \tag{93}$$

Y_l^m は $\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\sin^{|m|}\theta$ を $\cos\theta$ の多項式に掛けた積であり，この多項式の次数は $(l-|m|)$，偶奇性は $(-)^{l-m}$ である．特に

$$m=0 \qquad Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,P_l(\cos\theta) \tag{94}$$

$$m=l \qquad Y_l^l = (-)^l\left[\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2}\right]^{1/2}\sin^l\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}. \tag{95}$$

調和多項式と球面調和関数

x, y, z に関して l 次の同次多項式

$$\mathcal{Y}_l^m(\boldsymbol{r}) \equiv r^l Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad (m=-l,-l+1,\cdots,+l) \tag{96}$$

は $(2l+1)$ 個の線形独立な l 次調和多項式の列をつくる(8). すなわち

$$\triangle \mathcal{Y}_l^m(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{97}$$

球面調和関数のうち初めの数個の表

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1),$$

$$Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}(5\cos^3\theta-3\cos\theta),$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}, \quad Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},$$

$$Y_3^1 = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},$$

$$Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi}, \quad Y_3^2 = \sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi},$$

$$Y_3^3 = -\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta\,\mathrm{e}^{3\mathrm{i}\varphi}.$$

§ 11. 展開といろいろな公式

加法定理

$$\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\alpha) = \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\theta_1,\varphi_1)\,Y_l^m(\theta_2,\varphi_2) \tag{98}$$

(α は方向 (θ_1,φ_1) と (θ_2,φ_2) のあいだの角).

演算子 $\triangle$ と $\triangle+k^2$ のグリーン関数(9)

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|} = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}P_l(\cos\alpha) \tag{99}$$

$$\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|} = k\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,j_l(kr_<)\,h_l^{(+)}(kr_>)\,P_l(\cos\alpha) \tag{100}$$

$$\frac{\cos(k|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|} = k\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,j_l(kr_<)\,n_l(kr_>)\,P_l(\cos\alpha) \tag{101}$$

(α は $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の方向間の角; $r_<$ は $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の長さのうち小さい方; $r_>$ は $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の長さ

---

(8) 点 $\boldsymbol{r}=0$ で有限な任意の関数に対して成り立つ演算子間の等式

$$\triangle \equiv \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}$$

から (97) は導かれる. 関数 $h(x,y,z)$ が x,y,z について同次で, 方程式 $\triangle h=0$ を満たすとき, h は調和多項式であると定義する. l 次調和多項式のうちには線形独立なものが $(2l+1)$ 個存在する.

(9) $\triangle\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta(\boldsymbol{r})$, $(\triangle+k^2)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r})$, $(\triangle+k^2)\frac{\cos kr}{r} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r})$.

のうち大きい方).

公式 (100) と (101) はどのような k についても，k が複素数であっても成り立つ.

<u>平面波と純クーロン散乱波の展開</u>

極座標軸 ≡ z 軸 = 入射波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の方向

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \tag{102}$$

$$\psi_c = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\sigma_l} F_l(\gamma; kr) P_l(\cos\theta) \tag{103}$$

$$f_c(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\sigma_l} \sin\sigma_l P_l(\cos\theta). \tag{104}$$

$\gamma, \psi_c, f_c(\theta), F_l, \sigma_l$ の定義は§4と§5に述べたものである（式 (18), (19), (25), (29), (32)).

極座標軸の選び方を変えても，$\boldsymbol{k}$ 方向と $\boldsymbol{r}$ 方向のつくる角を θ で表わせば，展開(102), (103), (104) はそのまま成り立つ.

加法定理を適用すれば，球面調和関数による同じ式の級数展開が導き出される．これらの関数に含まれる独立変数は (θ_k, φ_k) と (θ_r, φ_r) である．たとえば，

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr) Y_l^{m*}(\theta_k, \varphi_k) Y_l^m(\theta_r, \varphi_r). \tag{105}$$

付録 C[1]

ベクトル和の係数と回転を表わす行列

目　次

(1) この付録は J. Horowitz との協力によって書かれた．これらの問題に関するもっと詳しい解説については，特に A. E. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1957 を見よ．このなかにはさらに，現在刊行されている主な表のリストが与えられている．また，U. Fano と G. Racah, *Irreducible Tensorial Sets*, Academic Press Inc., New York, 1959 を見よ．

§ 1.　角運動量．記号と規約

角運動量に関するつぎの記号と規約は，この付録をとおして用いられる．

単位：$\hbar = 1$.

角運動量の成分：$\boldsymbol{J}$ すなわち角運動量演算子は，直交座標系に関して成分 J_x, J_y, J_z をもち，

$$J_\pm = J_x \pm \mathrm{i} J_y. \tag{1}$$

交換関係

$$[J_x, J_y] = \mathrm{i} J_z, \qquad [J_y, J_z] = \mathrm{i} J_x, \qquad [J_z, J_x] = \mathrm{i} J_y \tag{2}$$

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm, \qquad [J_+, J_-] = 2 J_z. \tag{3}$$

標準表現 $\{\boldsymbol{J}^2 J_z\}$ の基底ベクトル：$|\tau JM\rangle$

$$\boldsymbol{J}^2 |\tau JM\rangle = J(J+1) |\tau JM\rangle \tag{4}$$

$$J_z |\tau JM\rangle = M |\tau JM\rangle \tag{5}$$

$$J_\pm |\tau JM\rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)}\, |\tau JM\pm 1\rangle \tag{6}$$

$$\langle \tau JM | \tau' J' M' \rangle = \delta_{\tau\tau'} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \tag{7}$$

（J は整数または半整数 $\geqslant 0$；$M = -J, -J+1, \cdots, +J$）．

τ によって表わされているのは，完全系をつくるために J と M に付け加えなければならない量子数の全体であるが，今後この付録では必要が生じない限りいつも省略する．

I．クレプシュ＝ゴーダン（C.-G.）係数と《3j》記号

§ 2.　定義と記号

$\boldsymbol{j}_1, \boldsymbol{j}_2$ はそれぞれ量子系１，２の角運動量．

$\boldsymbol{J}$ はこれら二つの系を合わせてつくられる系の角運動量，すなわち

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2. \tag{8}$$

系１の $(2j_1+1)$ 個のベクトル

$$|j_1 m_1\rangle \qquad (j_1 \text{ は固定}；m_1 = -j_1, \cdots, +j_1)$$

と，系２の $(2j_2+1)$ 個のベクトル

$$|j_2 m_2\rangle \qquad (j_2 \text{ は固定}；m_2 = -j_2, \cdots, +j_2)$$

とのテンソル積をとれば，$\boldsymbol{j}_1^2, \boldsymbol{j}_2^2, j_{1z}, j_{2z}$ に共通な $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個の固有ベクトル

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \tag{9}$$

が生じる．これから $\boldsymbol{j}_1^2, \boldsymbol{j}_2^2, \boldsymbol{J}^2, J_z$ に共通な $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個の固有ベクトル

$$|j_1 j_2 JM\rangle \qquad (J = |j_1 - j_2|, \cdots, j_1 + j_2;\ M = -J, \cdots, +J) \tag{10}$$

がユニタリ変換によって導き出される.

定義

クレブシュ=ゴーダン係数[2]すなわちベクトル和の係数 $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$ はこのユニタリ変換の係数である. すなわち

$$|j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle. \tag{11}$$

位相についての規約[3]

曖昧さを残さずに位相を定めるため, 列（9）と（10）に属するベクトルの相対的な位相をつぎの条件によって固定する：

i） $|j_1 m_1\rangle, |j_2 m_2\rangle, |j_1 j_2 JM\rangle$ は関係（6）にしたがう.

ii） $\langle j_1 j_2 j_1 (j_1-J)|JJ\rangle$ は実数で >0.

《3j》記号（ウィグナー）[4]：

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \equiv \frac{(-)^{j_1-j_2+M}}{\sqrt{2J+1}}\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle. \tag{12}$$

§ 3.　C.-G. の主な性質

実の性質. 係数はすべて実である. すなわち

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle^* = \langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle.$$

選択の規則

i） $m_1+m_2 = M$

ii） $|j_1-j_2| \leqslant J \leqslant j_1+j_2$ (《三角不等式》).

---

(2) クレブシュ=ゴーダン係数を表わすために用いられる記号は文献によってきわめてまちまちである. 主なものをあげると,

$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM\rangle$　(CONDON, SHORTLEY, *Theory of Atomic Spectra*, University Press, Cambridge, 第4版, 1957).

$C_{j_1 j_2}(JM\,;m_1 m_2)$　(BLATT, WEISSKOPF, *Theoretical Nuclear Physics*, Wiley, New York, 1952).

$S^{j_1 j_2}_{J m_1 m_2}$　(E. P. WIGNER, *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra* (英訳), Academic Press, New York, 1958).

(3) この規約は大多数の著者たち, 特に注(2)にあげた WIGNER, CONDON と SHORTLEY, BLATT と WEISSKOPF の書物, および RACAH, *Phys. Rev.*, **62**, (1942), 437 によって採用されている.

(4) RACAH の上記論文(3)では記号

$$V(abc, \alpha\beta\gamma) \equiv (-)^{a-b-c}\begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix} \equiv \frac{(-)^{c-\gamma}}{\sqrt{2c+1}}\langle ab\,\alpha\beta|c\,-\gamma\rangle$$

が用いられている.

これらの二つの条件が満たされないとき，$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle = 0$.

対称性の規則

$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ は

i）三つの列の円置換に対して不変である．

ii）二つの列を交換するとき $(-)^{j_1+j_2+j_3}$ が掛けられる．

iii）m_1, m_2, m_3 の符号を変えるとき $(-)^{j_1+j_2+j_3}$ が掛けられる．

結果：

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle = (-)^{j_1+j_2-J}\langle j_2 j_1 m_2 m_1 | JM\rangle \tag{13 a}$$

$$= (-)^{j_1-J+m_2}\sqrt{\frac{2J+1}{2j_1+1}}\langle J j_2 M -m_2 | j_1 m_1\rangle \tag{13 b}$$

$$= (-)^{j_2-J-m_1}\sqrt{\frac{2J+1}{2j_2+1}}\langle j_1 J -m_1 M | j_2 m_2\rangle \tag{13 c}$$

$$= (-)^{j_1+j_2-J}\langle j_1 j_2 -m_1 -m_2 | J -M\rangle. \tag{13 d}$$

直交関係

$$\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{+j_2}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J' M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{14 a}$$

$$(|j_1-j_2| \leqslant J \leqslant j_1+j_2;\ -J \leqslant M \leqslant J)$$

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{M=-J}^{+J}\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle\langle j_1 j_2 m_1' m_2' | JM\rangle = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'} \tag{14 b}$$

$$(-j_1 \leqslant m_1 \leqslant +j_1;\ -j_2 \leqslant m_2 \leqslant +j_2)$$

$$\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{+j_2}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \frac{1}{2j_3+1}\delta_{j_3j_3'}\delta_{m_3m_3'} \tag{15 a}$$

$$\sum_{j_3=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m_3=-j_3}^{+j_3}(2j_3+1)\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}. \tag{15 b}$$

球面調和関数の結合関係

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\Omega)\,Y_{l_2}^{m_2}(\Omega)\,Y_{l_3}^{m_3}(\Omega)\,\mathrm{d}\Omega$$

$$= \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}\right]^{1/2}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \tag{16}$$

これから

$$Y_{l_1}^{m_1}(\Omega)\,Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) = \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}\sum_{M=-L}^{L}\left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2L+1)}\right]^{1/2}\langle l_1 l_2 0 0 | L 0\rangle$$

$$\times\langle l_1 l_2 m_1 m_2 | L M\rangle\, Y_L^M(\Omega) \tag{17 a}$$

$$= \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}\sum_{M=-L}^{L}(-)^M\left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2L+1)}{4\pi}\right]^{1/2}$$

$$\times\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix}Y_L^{-M}(\Omega). \tag{17 b}$$

§ 4. C.－G. の計算法

漸化式

変数の値の差がたかだかつぎのような場合：

i） $\triangle J=0,\ \triangle M=+1.$

$$\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle$$
$$=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)}\langle j_1 j_2 m_1+1\, m_2|JM+1\rangle$$
$$+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2+1|JM+1\rangle. \tag{18}$$

ii） $\triangle J=0,\ \triangle M=-1.$

$$\sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle$$
$$=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\langle j_1 j_2 m_1-1\, m_2|JM-1\rangle$$
$$+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2-1|JM-1\rangle. \tag{19}$$

iii） $\triangle J=\pm1,\ \triangle M=0.$

$$A_0\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle = A_+\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J+1\, M\rangle + A_-\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J-1\, M\rangle. \tag{20}$$

ただし

$$A_0 = m_1-m_2+M\frac{j_2(j_2+1)-j_1(j_1+1)}{J(J+1)} \qquad (M=m_1+m_2)$$

$$A_+ = f(J+1), \qquad A_- = f(J)$$

$$f(x) = \sqrt{x^2-M^2}\left[\frac{[(j_1+j_2+1)^2-x^2][x^2-(j_1-j_2)^2]}{4x^2(2x-1)(2x+1)}\right]^{1/2}.$$

ラカーの公式

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix} = (-)^{a-b-\gamma}\sqrt{\triangle(abc)}\sqrt{(a+\alpha)!(a-\alpha)!(b+\beta)!(b-\beta)!(c+\gamma)!(c-\gamma)!}$$
$$\times\sum_t (-)^t[t!(c-b+t+\alpha)!(c-a+t-\beta)!(a+b-c-t)!(a-t-\alpha)!(b-t+\beta)!]^{-1} \tag{21}$$
$$(\alpha+\beta+\gamma=0,\ |a-b|\leqslant c\leqslant a+b).$$

ただし

$$\triangle(abc)\equiv\frac{(a+b-c)!(b+c-a)!(c+a-b)!}{(a+b+c+1)!}. \tag{22}$$

$\sum_t$ は t の整数値について加えることを示すが，t の動く範囲は階乗がすべて意味をもつような値，すなわち階乗をとる数が正または0になるような値の全体である $(0!=1)$. 9個の数

$$a\pm\alpha \qquad b\pm\beta \qquad c\pm\gamma$$
$$a+b-c \qquad b+c-a \qquad c+a-b$$

のうち最小のものを ν とすれば，上記の和に含まれる項の個数は $\nu+1$ である.

§5.　注意すべき値と表

注意すべき値

i）　J と M が最大値をとるとき，$\langle j_1\,j_2\,j_1\,j_2|j_1+j_2\,j_1+j_2\rangle = 1.$

ii）　j のうちの一つが 0 のとき，

$$\langle j\,0\,m\,0|j\,m\rangle = 1 \qquad \text{すなわち} \qquad \begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}.$$

iii)　$m_1 = m_2 = m_3 = 0$ のとき，

$l_1+l_2+l_3$ が奇数ならば

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0, \tag{23 a}$$

$2p \equiv l_1+l_2+l_3$ が偶数ならば，

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-)^p\sqrt{\Delta(l_1l_2l_3)}\,\frac{p!}{(p-l_1)!\,(p-l_2)!\,(p-l_3)!} \tag{23 b}$$

（l_1, l_2, l_3 は整数 $\geqslant 0$ で，《三角不等式》を満たす）．

ラカーの公式の特殊な場合

以下にあげる公式またはそれから対称の関係によって導かれる公式は，つぎの特殊な場合における C.-G. を与える．

i）　$m_1 = \pm j_1$ または $m_2 = \pm j_2$ または $M = \pm J$ のとき．

$$\langle j_1\,j_2\,m_1\,m_2|J J\rangle = \langle j_2\,j_1\,-m_2\,-m_1|J\,-J\rangle$$

$$= (-)^{j_1-m_1}\sqrt{\frac{(2J+1)!\,(j_1+j_2-J)!}{(j_1+j_2+J+1)!\,(J+j_1-j_2)!\,(J+j_2-j_1)!}}\sqrt{\frac{(j_1+m_1)!\,(j_2+m_2)!}{(j_1-m_1)!\,(j_2-m_2)!}} \tag{24}$$

$$(m_1+m_2 = J).$$

ii）　j のうちの一つが他の二つの和であるとき．$J = j_1+j_2$ ならば，

$$\langle j_1\,j_2\,m_1\,m_2|JM\rangle = \sqrt{\frac{(2j_1)!\,(2j_2)!}{(2J)!}}\sqrt{\frac{(J+M)!\,(J-M)!}{(j_1+m_1)!\,(j_1-m_1)!\,(j_2+m_2)!\,(j_2-m_2)!}} \tag{25}$$

$$\langle J j_2\,M-m_2|j_1\,m_1\rangle = (-)^{j_2-m_2}\sqrt{\frac{2j_1+1}{2J+1}}\langle j_1\,j_2\,m_1\,m_2|JM\rangle. \tag{26}$$

《3j》記号の表

つぎの表は記号

$$\begin{pmatrix} j & s & (j+e) \\ m & \mu & (-m-\mu) \end{pmatrix}$$

を j と m の関数として表わす式を与える．ただし

$$s = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ 2; \qquad 0 \leqslant e \leqslant s, \qquad 0 \leqslant \mu \leqslant s.$$

対称の関係を使えば，j のうちの一つが 0, 1/2, 1, 3/2 または 2 であるとき，すべての C.-G. をこれらの表から計算することが容易にできる．

表に書かれた関数は，

$$\begin{pmatrix} j & s & (j+e) \\ m & \mu & (-m-\mu) \end{pmatrix} = (-)^{j+m}\sqrt{\frac{(2j+e-s)\,!}{(2j+e+s+1)!}\frac{(j+m+\mu+e)!}{(j+m)!}}\,\Phi^{s}_{\mu e} \qquad (27)$$

によって定められる関数 $\Phi^{s}_{\mu e}(j,m)$ である．

$s=0$　　　$\Phi^{0}_{00}=1$

$s=\frac{1}{2}$　　　$\Phi^{1/2}_{1/2\ 1/2}=1$

$s=1$　　　$\Phi^{1}_{\mu e}$ の表

	$e=0$	$e=1$
$\mu=0$	$-2m$	$-\sqrt{2(j-m+1)}$
$\mu=1$	$-\sqrt{2(j-m)}$	1

$s=\frac{3}{2}$　　　$\Phi^{3/2}_{\mu e}$ の表

	$e=\frac{1}{2}$	$e=\frac{3}{2}$
$\mu=\frac{1}{2}$	$j-3m$	$-\sqrt{3(j-m+1)}$
$\mu=\frac{3}{2}$	$-\sqrt{3(j-m)}$	1

$s=2$　　　$\Phi^{2}_{\mu e}$ の表

	$e=0$	$e=1$	$e=2$
$\mu=0$	$2[3m^2-j(j+1)]$	$2m\sqrt{6(j-m+1)}$	$\sqrt{6(j-m+2)(j-m+1)}$
$\mu=1$	$(2m+1)\sqrt{6(j-m)}$	$2(j-2m)$	$-2\sqrt{j-m+1}$
$\mu=2$	$\sqrt{6(j-m)(j-m-1)}$	$-2\sqrt{j-m}$	1

II. ラカー係数と《6j》記号

§ 6.　定義と記号

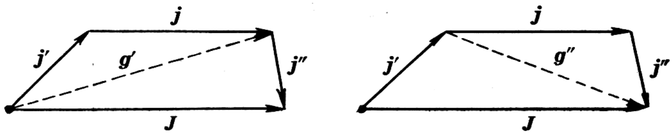
三つの角運動量の結合

三つの異なる系がそれぞれ角運動量 j, j', j'' をもつとき，これらを合わせてつくられる系の全角運動量 J は

$$J = j+j'+j''.$$

ベクトル $|m\, m'\, m''\rangle \equiv |j\, m\rangle |j'\, m'\rangle |j''\, m''\rangle$ (j, j', j'' は与えられた数；m, m', m'' は変数）によって張られる $(2j+1)(2j'+1)(2j''+1)$ 次元空間のなかで，角運動量 (JM) の部分空間はときにより1次元より大きい次元をもつ [$2J$ と $2M$ は $2(j+j'+j'')$ と同じ偶奇性をもつ整数；$\min|j\pm j'\pm j''| \leqslant J \leqslant j+j'+j''$；$-J \leqslant M \leqslant +J$].

つぎのような二つの結合法[5]により，この部分空間の基底ベクトル系として，一般には異なる二つの系がつくられる：



(a)　$j'+j=g'$
　　$g'+j''=J$

(b)　$j+j''=g''$
　　$j'+g''=J$

C·1図　$J=j+j'+j''$．異なる結合法

a)　$j'+j=g',\ g'+j''=J$ (C·1図(a))——ベクトル $|(j'j)g', j''; JM\rangle$

$$|(j'j)g', j''; JM\rangle = \sum_{\substack{mm'm''\\ \mu'}} |m\, m'\, m''\rangle \langle j'\, j\, m'\, m|g'\, \mu'\rangle \langle g'\, j''\, \mu'\, m''|JM\rangle.$$

b)　$j+j''=g'',\ j'+g''=J$ (C·1図(b))——ベクトル $|j', (jj'')g''; JM\rangle$

$$|j', (jj'')g''; JM\rangle = \sum_{\substack{mm'm''\\ \mu''}} |m\, m'\, m''\rangle \langle j\, j''\, m\, m''|g''\, \mu''\rangle \langle j'\, g''\, m'\, \mu''|JM\rangle.$$

一つの基底系からもう一つの系にはユニタリ変換で移る．

ウィグナーの《$6j$》記号 $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}$ の定義

これらの記号は上記のユニタリ変換の係数と結びつけられ，つぎの式で定義される．

$$\langle j', (jj'')g''; JM|(j'j)g', j''; J'\, M'\rangle$$
$$= \delta_{JJ'}\delta_{MM'}\sqrt{(2g'+1)(2g''+1)}\,(-)^{j+j'+j''+J} \begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}, \tag{28}$$

すなわち

$$|(j'j)g', j''; JM\rangle$$
$$= \sum_{g''} |j', (jj'')g''; JM\rangle \sqrt{(2g'+1)(2g''+1)}\,(-)^{j+j'+j''+J} \begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}. \tag{29}$$

ラカーの W 係数[6]

---

(5)　異なるベクトルを結合するときの順序には十分注意せよ．この順序を変えると，たとえば結合 a) において j と j' の順序を入れかえると，それから生じるベクトルの符号を修正することも起こる．

(6)　RACAH，前掲論文．まえの二つの関係式において，《$6j$》の代りに W を使えば符号の因数が消える．しかしながら，《$6j$》の方が対称の関係はいっそう簡明である（§7を参照）．

ラカーの用いた W 係数は符号を除けば《6j》記号に等しい．すなわち

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = (-)^{j_1+j_2+J_1+J_2} W(j_1 j_2 J_2 J_1 ; j_3 J_3). \tag{30}$$

関連のある諸係数

角度分布(*)を表わす式において，ときどき係数 $Z(LJL'J';j\lambda)$ と $F_\lambda(LL'J_1J_2)$ に出会うことがある．これらについては詳しい表ができているが，その定義はつぎのとおりである：

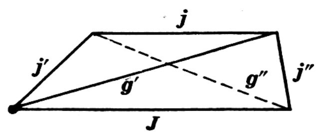
$$Z(LJL'J';j\lambda) = (-)^{J+J'+(L'-L+\lambda)/2}\sqrt{(2L+1)(2L'+1)(2J+1)(2J'+1)(2\lambda+1)} \times \begin{pmatrix} L & L' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L & L' & \lambda \\ J' & J & j \end{Bmatrix} \tag{31 a}$$

$$F_\lambda(LL'J_1J_2) = (-)^{J_1+J_2-1}\sqrt{(2L+1)(2L'+1)(2J_2+1)(2\lambda+1)} \begin{pmatrix} L & L' & \lambda \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L & L' & \lambda \\ J_2 & J_2 & J_1 \end{Bmatrix}. \tag{31 b}$$

係数 $F_\lambda(LL'J_1J_2)$ が特によく現われるのは，核反応で生成された粒子群がスピン1の粒子を含み，偏りが観測されないときである．

《6j》に対応する四面体

W 係数または《6j》記号を取り扱うとき，いろいろな混乱を避けるためには，各記号 $\begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}$ に一つの四面体を結びつけ，その各辺によって記号に含まれる6個の角運動量を表わすとつごうがよい(C·2図)．この表現において，向かいあった二辺はいつも同じ列に属する角運動量に結びつけられる．また，第1行に属する三つの角運動量に対応する辺は四面体の一つの面を囲む．さらに，どの面に対しても三つの角運動量が対応し，《6j》記号の定義そのものにより，そのうちの一つは他の二つのベクトル和によって得られる．



C·2図　記号 $\begin{Bmatrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{Bmatrix}$ に対応する四面体

§ 7. 《6j》の主な性質

実の性質

《6j》はすべて実数である．

選択の規則

$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} \neq 0$ となるためには，対応する四面体のどの面をとっても，その面によって

(*) ［訳注］衝突（散乱）の問題などで，どの方向には散乱された粒子がたくさん出てくるが，どの方向には少ないというような方向による違いを表わす分布．

表わされる三つの角運動量のうちの一つが，実際に他の二つの和になりうることが必要である．言いかえれば，4個の三つ組

$$(j_1 j_2 j_3) \quad (j_1 J_2 J_3) \quad (J_1 j_2 J_3) \quad (J_1 J_2 j_3)$$

のうちどの一つをとっても，その組に属する三つの要素は，

i）　三角不等式を満たし，

ii）　和は整数となる

ことが必要である．

（注意；6個の j が整数であるか，または一つの面を囲む3個の j が整数であるか，または向かいあう二辺に対応する2個の j が整数である）．

対称の関係．《6j》記号はつぎの場合に不変である．

i）　列を置換するとき，たとえば $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ J_2 & J_1 & J_3 \end{Bmatrix}$，

ii）　第1行の二つの要素と，それらに対応する第2行の要素とを交換するとき，たとえば $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ j_1 & j_2 & J_3 \end{Bmatrix}$．

言いかえると，《6j》記号の値を定めるには，6個の角運動量の値と，対応する四面体におけるそれらの相互の位置が与えられればよい．

C.-G. を含む基本的な関係

記号 $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}$ に対応する四面体の四つの面によって，4個の三つ組 $(j_1 j_2 j_3)$，$(j_1 J_2 J_3)$ $(J_1 j_2 J_3)$，$(J_1 J_2 j_3)$ が定まる．つぎの関係式はこれらの組からつくられる C.-G. 係数に，初めの記号を結びつけるものである：

$$\sum_{\substack{M_1 M_2 M_3 \\ m_1 m_2}} (-)^{J_1+J_2+J_3+M_1+M_2+M_3} \times \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ M_1 & -M_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_2 & J_3 & j_1 \\ M_2 & -M_3 & m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_3 & J_1 & j_2 \\ M_3 & -M_1 & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j'_3 \\ m_1 & m_2 & m'_3 \end{pmatrix} = \delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3} \frac{1}{2j_3+1} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}. \tag{32}$$

（注意；この和は事実上二つの添字について行なわれるにすぎない．M と m とのあいだに関係があるからである．）

$$\sum_{M_1 M_2 M_3} (-)^{J_1+J_2+J_3+M_1+M_2+M_3} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ M_1 & -M_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_2 & J_3 & j_1 \\ M_2 & -M_3 & m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_3 & J_1 & j_2 \\ M_3 & -M_1 & m_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix}. \tag{33}$$

（注意；この和は事実上一つの添字について行なわれる．）

$$\sum_{g\,m_g}(-)^{g+m_g}(2g+1)\begin{Bmatrix} j_1 & J_1 & g \\ J_2 & j_2 & f \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & J_1 & g \\ m_1 & M_1 & -m_g \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & J_2 & g \\ m_2 & M_2 & m_g \end{pmatrix}$$

$$= (-)^{j_2+J_1+f+g}\sum_{m_f}(-)^{f+m_f}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & f \\ m_1 & m_2 & -m_f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & f \\ M_1 & M_2 & m_f \end{pmatrix}. \qquad (34)$$

(注意；m_g と m_f についての和はそれぞれ一つの項しか含まない.)

ラカー=エリオットの関係と直交関係

$$\sum_x(-)^{2x}(2x+1)\begin{Bmatrix} a & b & x \\ a & b & f \end{Bmatrix} = 1 \qquad (35\,a)$$

$$\sum_x(-)^{a+b+x}(2x+1)\begin{Bmatrix} a & b & x \\ b & a & f \end{Bmatrix} = \delta_{f0}\sqrt{(2a+1)(2b+1)} \qquad (35\,b)$$

$$\sum_x(2x+1)\begin{Bmatrix} a & b & x \\ c & d & f \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} c & d & x \\ a & b & g \end{Bmatrix} = \delta_{fg}\frac{1}{2f+1} \qquad (35\,c)$$

$$\sum_x(-)^{f+g+x}(2x+1)\begin{Bmatrix} a & b & x \\ c & d & f \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} c & d & x \\ b & a & g \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} a & d & f \\ b & c & g \end{Bmatrix} \qquad (35\,d)$$

$$\sum_x(-)^{a+b+c+d+e+f+g+h+x+j}(2x+1)$$
$$\times\begin{Bmatrix} a & b & x \\ c & d & g \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} c & d & x \\ e & f & h \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} e & f & x \\ b & a & j \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} g & h & j \\ e & a & d \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} g & h & j \\ f & b & c \end{Bmatrix}. \qquad (35\,e)$$

§ 8. ラカーの簡約公式と表

ラカーの公式

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{Bmatrix} = [\triangle(j_1 j_2 j_3)\ \triangle(j_1 J_2 J_3)\ \triangle(J_1 j_2 J_3)\ \triangle(J_1 J_2 j_3)]^{1/2}$$
$$\times\sum_t\frac{(-)^t(t+1)!}{\begin{matrix}(t-j_1-j_2-j_3)!\,(t-j_1-J_2-J_3)!\,(t-J_1-j_2-J_3)!\,(t-J_1-J_2-j_3)! \\ \times(j_1+j_2+J_1+J_2-t)!\,(j_2+j_3+J_2+J_3-t)!\,(j_3+j_1+J_3+J_1-t)!\end{matrix}} \qquad (36)$$

$\triangle(abc)$ の意味と和についての規約は公式 (22) の場合と同じである. 12個の数

$$\begin{matrix} j_1+j_2-j_3 & j_1+J_2-J_3 & J_1+j_2-J_3 & J_1+J_2-j_3 \\ j_2+j_3-j_1 & J_2+J_3-j_1 & j_2+J_3-J_1 & J_2+j_3-J_1 \\ j_3+j_1-j_2 & J_3+j_1-J_2 & J_3+J_1-j_2 & j_3+J_1-J_2 \end{matrix}$$

のうち最小のものを σ とすれば, 上記の $\sum_t$ に含まれる項の個数は $1+\sigma$ に等しい.

特殊な場合

i) j の一つが0のとき

$$\begin{Bmatrix} j & j' & 0 \\ J & J' & g \end{Bmatrix} = (-)^{j+J+g}\frac{\delta_{jj'}\delta_{JJ'}}{\sqrt{(2j+1)(2J+1)}} \qquad (|j-J| \leqq g \leqq j+J) \qquad (37)$$

ii) j の一つが 1/2 のとき

$$\begin{Bmatrix} j & j+\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & J+\frac{1}{2} & g+\frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-)^{1+g+j+J}\left[\frac{(1+g+j-J)(1+g-j+J)}{(2j+1)(2j+2)(2J+1)(2J+2)}\right]^{1/2} \tag{38}$$

$$(|j-J| \leqslant g \leqslant j+J)$$

$$\begin{Bmatrix} j & j+\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J+\frac{1}{2} & J & g \end{Bmatrix} = (-)^{1+g+j+J}\left[\frac{(1-g+j+J)(2+g+j+J)}{(2j+1)(2j+2)(2J+1)(2J+2)}\right]^{1/2} \tag{39}$$

$$(|j-J| \leqslant g \leqslant j+J)$$

III. 《9*j*》 記　号

§ 9.　定義と主な性質

<u>四つの角運動量の結合と《9*j*》の定義</u>

四つの異なる系がそれぞれ角運動量 j_1, j_2, j_3, j_4 をもつとき，これらを合わせてつくられる系の全角運動量 $\boldsymbol{J}$ は

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2+\boldsymbol{j}_3+\boldsymbol{j}_4.$$

ベクトル

$$|m_1 m_2 m_3 m_4\rangle \equiv \prod_{i=1}^{4} |j_i m_i\rangle \qquad (j_i \text{ は与えられた数，} m_i \text{ は変数})$$

によって張られる $\prod_{i=1}^{4}(2j_i+1)$ 次元の空間において，つぎのような二つの結合法により，角運動量 (JM) の部分空間の基底ベクトル系として，二つの異なる系が導かれる．

a)　$\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2 = \boldsymbol{J}_{12}, \quad \boldsymbol{j}_3+\boldsymbol{j}_4 = \boldsymbol{J}_{34}, \quad \boldsymbol{J}_{12}+\boldsymbol{J}_{34} = \boldsymbol{J},$

　ベクトル　$|(j_1j_2)J_{12}, (j_3j_4)J_{34}; JM\rangle$.

b)　$\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_3 = \boldsymbol{J}_{13}, \quad \boldsymbol{j}_2+\boldsymbol{j}_4 = \boldsymbol{J}_{24}, \quad \boldsymbol{J}_{13}+\boldsymbol{J}_{24} = \boldsymbol{J},$

　ベクトル　$|(j_1j_3)J_{13}, (j_2j_4)J_{24}; JM\rangle$.

一つの基底からもう一つの基底へ移ることはユニタリ変換によってできるが，ウィグナーの《9*j*》記号はこの変換の係数と一つの定数を除いて一致する．その定義は

$$\langle(j_1j_2)J_{12}, (j_3j_4)J_{34}; JM|(j_1j_3)J_{13}, (j_2j_4)J_{24}; J'M'\rangle$$
$$= \delta_{JJ'}\delta_{MM'}\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}. \tag{40 a}$$

《9*j*》はつぎの式によっても定義される：

$$\langle[(j_1j_2)J_{12}, j_3]J_{123}j_4; JM|[(j_4j_2)J_{42}, j_3]J_{423}j_1; J'M'\rangle$$
$$= (-)^{J_{423}+j_1-J_{123}-j_4}\delta_{JJ'}\delta_{MM}\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{123}+1)(2J_{42}+1)(2J_{423}+1)}$$

$$\times\begin{Bmatrix} j_2 & J_{12} & j_1 \\ J_{42} & j_3 & J_{423} \\ j_4 & J_{123} & J \end{Bmatrix}. \tag{40 b}$$

つぎの記号も用いられる：

$$X\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{pmatrix} = \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}.$$

《3j》記号を含む関係

$$\begin{pmatrix} J_{13} & J_{24} & J \\ M_{13} & M_{24} & M \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}$$

$$= \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 m_4 \\ M_{12} M_{34}}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ m_1 & m_2 & M_{12} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_3 & j_4 & J_{34} \\ m_3 & m_4 & M_{34} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_3 & J_{13} \\ m_1 & m_3 & M_{13} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & j_4 & J_{24} \\ m_2 & m_4 & M_{24} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_{12} & J_{34} & J \\ M_{12} & M_{34} & M \end{pmatrix}. \tag{40 c}$$

対称の関係

$\begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ J_4 & J_5 & J_6 \\ J_7 & J_8 & J_9 \end{Bmatrix}$ は

i） 二つの行または二つの列を入れかえるとき，$(-)^R$ 倍になる $(R=\sum_{i=1}^{9} J_i)$.

ii） 二つの対角線のどちらに関して反転しても不変である．

直交関係

$$\sum_{J_{13} J_{24}} (2J_{13}+1)(2J_{24}+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J'_{12} \\ j_3 & j_4 & J'_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} = \frac{\delta_{J_{12}J'_{12}}\delta_{J_{34}J'_{34}}}{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)}.$$

《6j》記号を含む関係

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} = \sum_g (-)^{2g}(2g+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ J_{34} & J & g \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_3 & j_4 & J_{34} \\ j_2 & g & J_{24} \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} J_{13} & J_{24} & J \\ g & j_1 & j_3 \end{Bmatrix}. \tag{41}$$

j の一つが 0 である場合

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & f \\ j_3 & j_4 & f' \\ g & g' & 0 \end{Bmatrix} = \delta_{ff'}\delta_{gg'}\frac{(-)^{j_2+j_3+f+g}}{\sqrt{(2f+1)(2g+1)}}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & f \\ j_4 & j_3 & g \end{Bmatrix}. \tag{42}$$

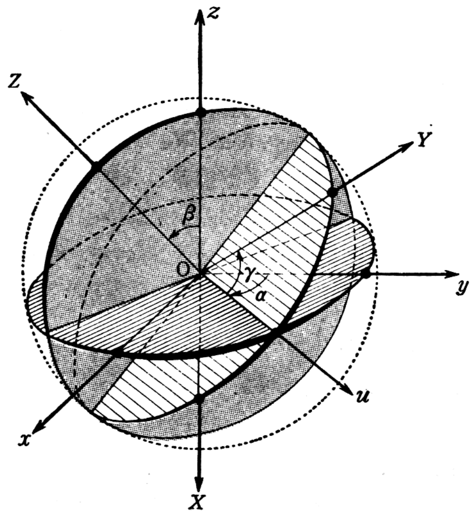
IV. 回転を表わす行列

§ 10. 回転．回転演算子．行列 $R^{(J)}$

$$\mathcal{R}_u(\varphi) \equiv u \text{ 軸のまわりの角 } \varphi \text{ の回転}$$

$$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) \equiv \text{オイラーの角 } (\alpha,\beta,\gamma) \text{ の回転} \equiv \mathcal{R}_Z(\gamma)\mathcal{R}_u(\beta)\mathcal{R}_z(\alpha). \tag{43}$$

右辺の演算は右から左への順につづけて行なう（C・3 図を参照）．



C・3 図　オイラーの角．
$\alpha = (Oy, Ou)$，$\beta = (Oz, OZ)$，$\gamma = (Ou, OY)$．

回転を表わす行列：ベクトルの成分の変換行列（これを回転そのものと同じ文字 $\mathcal{R}$ で表わす）．

任意のベクトル $\boldsymbol{V}(V_1, V_2, V_3)$ が回転 $\mathcal{R}$ によって $\boldsymbol{V}'(V'_1, V'_2, V'_3)$ に変換されるとき，$V'_i = \mathcal{R}_{ij}V_j$，$\mathcal{R}_{ij}$ はこの行列の要素である．

［結果．j 番目の軸に沿う単位ベクトル $\boldsymbol{a}_j$ が $\boldsymbol{A}_j$ に変換される（$j=1, 2, 3$）とき，$\boldsymbol{A}_j \equiv \mathcal{R}[\boldsymbol{a}_j] = \boldsymbol{a}_i\mathcal{R}_{ij}$，$\mathcal{R}_{ij} = (\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{A}_j)$］．

$$\mathcal{R}^* = \mathcal{R},\quad \tilde{\mathcal{R}} = \mathcal{R}^{-1},\quad \det\mathcal{R} = 1 \tag{44}$$

$$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) \equiv \begin{pmatrix} \cos\gamma\cos\beta\cos\alpha - \sin\gamma\sin\alpha & -\sin\gamma\cos\beta\cos\alpha - \cos\gamma\sin\alpha & \sin\beta\cos\alpha \\ \cos\gamma\cos\beta\sin\alpha + \sin\gamma\cos\alpha & -\sin\gamma\cos\beta\sin\alpha + \cos\gamma\cos\alpha & \sin\beta\sin\alpha \\ -\cos\gamma\sin\beta & \sin\gamma\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \tag{45}$$

回転演算子

各ケットベクトル $|\ \rangle$ に，回転 $\mathcal{R}$ を施して得られるベクトルを対応させるユニタリ演算子 R である．すなわち

$$\mathcal{R}[|\ \rangle] \equiv R|\ \rangle,\qquad R^\dagger R = RR^\dagger = 1. \tag{46}$$

量子系に結びついたオブザーバブルを Q とするとき，

$$\mathcal{R}[Q] \equiv RQR^{-1}. \tag{47}$$

量子系に結びついたベクトル演算子を $\boldsymbol{B} \equiv (B_x, B_y, B_z)$ とするとき（$B_i \equiv (\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{a}_i)$），

$$\mathcal{R}[B_i] \equiv RB_iR^{-1} = (\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A}_i) = \tilde{\mathcal{R}}_{ij}B_j. \tag{48}$$

注意；ここに入ってくるのは $\mathcal{R}$ の逆行列であって $\mathcal{R}$ そのものではない．

回転 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ による角運動量 $\boldsymbol{J}$ の成分の変換に公式（48）を適用すれば，つぎの結果が得られる：

$$RJ_{\pm}R^{-1} = \mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\gamma}\left[\frac{1+\cos\beta}{2}\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\alpha}J_{\pm}-\frac{1-\cos\beta}{2}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\alpha}J_{\mp}-\sin\beta J_z\right] \tag{49 a}$$

$$RJ_zR^{-1} = \frac{1}{2}\sin\beta(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}J_{+}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}J_{-})+\cos\beta J_z. \tag{49 b}$$

全角運動量 $\boldsymbol{J}$ の関数として表わす式

無限小回転：

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varepsilon) = 1-\mathrm{i}\varepsilon(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u}) \qquad (\varepsilon \ll 1). \tag{50}$$

有限な回転：

$$R_{\boldsymbol{u}}(\varphi) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})} \tag{51}$$

$$R(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta J_y}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma J_z}. \tag{52}$$

回転と回転演算子のあいだの対応

無限小回転と 1 に限りなく近い演算子 R とのあいだの対応は一対一であるが，有限な回転に対しては必ずしも同じことが成り立たない．

任意の有限な回転 $\mathcal{R}$ には，一般に二つの回転演算子 R' と R'' が対応し，これらは

$$R'' = DR'$$

という関係で結ばれている．ただし D は $\boldsymbol{J}^2$ の関数であり，

$$D=\begin{cases}+1 & (J\text{ が整数のとき})\\ -1 & (J\text{ が半整数のとき}).\end{cases}$$

$R' = R''$ となるためには，状態空間が整数の J をもつ状態だけからできていることが必要である．

$$R_{\boldsymbol{u}}(2\pi) = D, \qquad R_{\boldsymbol{u}}(4\pi) = 1.$$

二組のオイラーの角（$\alpha\beta\gamma$）と（$\alpha_1\beta_1\gamma_1$）が同じ回転を定めるとき（第13章（42））：

$$R(\alpha_1\beta_1\gamma_1) = D^{n_\alpha+n_\beta+n_\gamma}R(\alpha\beta\gamma). \tag{53}$$

回転を表わす行列 $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$

つぎの要素から成る（$2J+1$）次元の行列である：

$$R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma) \equiv \langle JM|R(\alpha\beta\gamma)|JM'\rangle \equiv \langle JM|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta J_y}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma J_z}|JM'\rangle. \tag{54}$$

ベクトル $|JM\rangle$（J は固定，$M = -J, \cdots, +J$）は $\boldsymbol{J}^2$ と J_z に共通な（$2J+1$）個の固有ベクトルであり，それらは互いに関係（6）によって導き出される．

行列 $r^{(J)}(\beta)$

$$r^{(J)}(\beta) \equiv R^{(J)}(0,\beta,0)$$

$$r^{(J)}_{MM'}(\beta) \equiv \langle JM|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta J_y}|JM'\rangle \tag{55}$$

$$R^{(J)}_{MM'}(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha M} r^{(J)}_{MM'}(\beta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma M'}. \tag{56}$$

§ 11. 行列 $R^{(J)}$ の一般的性質

逆：
$$[R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)]^{-1} = R^{(J)}(-\gamma, -\beta, -\alpha). \tag{57}$$

行列式：
$$\det R^{(J)} = 1. \tag{58}$$

一意性：
$$R^{(J)}_{u}(2\pi) = (-)^{2J}. \tag{59}$$

オイラーの角の任意の一組にただ一つの行列 $R^{(J)}$ が対応する.

任意の回転 $\mathcal{R}$ に対して，J が整数のときにはただ一つの行列 $R^{(J)}$ が対応し，J が半整数のときには互いに反対符号をもつ二つの行列が対応する.

実の性質

$r^{(J)}(\beta)$ は実行列である.

軸のまわりの π だけの回転

記号：X, Y, Z はそれぞれ $\mathrm{O}x, \mathrm{O}y, \mathrm{O}z$ のまわりの $+\pi$ の回転演算子.

$$X^2 = Y^2 = Z^2 = XYZ = (-)^{2J} \tag{60}$$

$$X|JM\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J}|J\,-M\rangle, \quad したがって \quad X^{(J)}_{MM'} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J}\delta_{M\,-M'} \tag{61}$$

$$Y|JM\rangle = (-)^{J-M}|J\,-M\rangle, \quad したがって \quad Y^{(J)}_{MM'} = (-)^{J-M}\delta_{M\,-M'} \tag{62}$$

$$Z|JM\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi M}|JM\rangle, \quad したがって \quad Z^{(J)}_{MM'} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi M}\delta_{MM'}. \tag{63}$$

回転 Y による角運動量演算子の変換：

$$YJ_xY^\dagger = -J_x, \qquad YJ_yY^\dagger = J_y, \qquad YJ_zY^\dagger = -J_z, \qquad YJ_\pm Y^\dagger = -J_\mp.$$

これから

$$YR^{(J)}Y^\dagger = R^{(J)*}. \tag{64}$$

対称の関係（(62) と (64) から導かれる)

$$r^{(J)}_{MM'} = (-)^{M-M'} r^{(J)}_{-M,-M'} \tag{65}$$

$$R^{(J)*}_{MM'} = (-)^{M-M'} R^{(J)}_{-M,-M'}. \tag{66}$$

ユニタリ関係と直交関係

$R^{(J)\dagger} = R^{(J)-1}$ からユニタリ関係

$$\sum_M R^{(J)}_{MM'} R^{(J)*}_{MM''} = \delta_{M'M''}, \qquad \sum_M R^{(J)}_{M'M} R^{(J)*}_{M''M} = \delta_{M'M''}, \tag{67}$$

また，対称の関係を考慮に入れると直交関係

$$\begin{aligned} &\sum_M (-)^{J+M} R^{(J)}_{MM'} R^{(J)}_{-M-M''} = (-)^{J+M'}\delta_{M'M''} \\ &\sum_M (-)^{J+M} R^{(J)}_{M'M} R^{(J)}_{-M''-M} = (-)^{J+M'}\delta_{M'M''} \end{aligned} \tag{68}$$

が得られる.

還元公式と結合公式

つぎの公式は同じオイラーの角に対する行列 $R^{(j_1)}, R^{(j_2)}, R^{(J)}$ に関するものである.

テンソル積 $R^{(j_1)}\otimes R^{(j_2)}$ の還元：

$$R^{(j_1)}_{m_1m'_1}R^{(j_2)}_{m_2m'_2}=\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{M,M'=-J}^{+J}\langle j_1j_2m_1m_2|JM\rangle\ R^{(J)}_{MM'}\langle j_1j_2m'_1m'_2|JM'\rangle. \quad (69)$$

結合公式：

$$R^{(J)}_{MM'}=\sum_{m_1,m'_1=-j_1}^{+j_1}\sum_{m_2,m'_2=-j_2}^{+j_2}\langle j_1j_2m_1m_2|JM\rangle \times R^{(j_1)}_{m_1m'_1}R^{(j_2)}_{m_2m'_2}\langle j_1j_2m'_1m'_2|JM'\rangle. \quad (70)$$

特に $J=j_1+j_2$ のとき，

$$R^{(J)}_{JJ}=R^{(j_1)}_{j_1j_1}R^{(j_2)}_{j_2j_2},\qquad R^{(J)}_{J-J}=R^{(j_1)}_{j_1-j_1}R^{(j_2)}_{j_2-j_2} \quad (71)$$

となる．

§ 12. 行列 $R^{(J)}_{MM'}$ の要素の計算

主な計算法

行列 $r^{(J)}(\beta)$ が知られれば，行列 $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$ は等式 (56) を用いて容易に導き出される．

$r^{(J)}$ は実，ユニタリで，対称の性質 (65) をもつ．すなわち

$$r^{(J)}_{MM'}(\beta)=r^{(J)}_{M'M}(-\beta)=(-)^{M-M'}r^{(J)}_{-M-M'}(\beta).$$

それゆえ，$M\geqslant 0$, $M\geqslant M'$ に対応する行列要素を知りさえすれば，他のすべての要素を導き出すことができる．

上記の要素については，つぎの方法がある：

a) のちに与えられるウィグナーの公式によって直接に計算する．

b) 結合の法則 (70) を使って，もっと小さい角運動量に関する行列 $r^{(j_1)}, r^{(j_2)}$ の要素から導く．特に，すべての行列 $r^{(J)}$ は $r^{(1/2)}$ から始めて順に求められる．

c) (49) から出てくる漸化式を使って，互いに他のものから導き出す．

ウィグナーの公式

$$\xi\equiv\cos\frac{1}{2}\beta,\qquad \eta\equiv\sin\frac{1}{2}\beta$$

と置くと，

$$r^{(J)}_{MM'}=\sum_t(-)^t\frac{\sqrt{(J+M)!\,(J-M)!\,(J+M')!\,(J-M')!}}{(J+M-t)!\,(J-M'-t)!\,t!\,(t-M+M')!}\times\xi^{2J+M-M'-2t}\eta^{2t-M+M'} \quad (72)$$

が成り立つ．和に関する規約は公式 (21) のときと同じである．4個の数 $J\pm M, J\pm M'$ のうち最小のものを τ とすれば，$\sum_t$ の項の個数は $\tau+1$ に等しい．

$r^{(J)}_{MM'}$ は二つの変数 ξ と η に関して $2J$ 次の同次多項式である．

ウィグナーの公式の特殊な場合

$$r^{(J)}_{MJ} = (-)^{J-M} r^{(J)}_{JM} = r^{(J)}_{-J-M} = (-)^{J-M} r^{(J)}_{-M-J}$$
$$= \sqrt{\frac{(2J)!}{(J+M)!\,(J-M)!}}\,\xi^{J+M}\eta^{J-M} \tag{73}$$
$$r^{(J)}_{JJ} = r^{(J)}_{-J-J} = \xi^{2J}, \qquad r^{(J)}_{J-J} = (-)^{2J} r^{(J)}_{J-J} = \eta^{2J}.$$

$J=1/2$ の場合

$$R^{1/2}(\alpha\beta\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2}\cos\frac{1}{2}\beta\, e^{-i\gamma/2} & -e^{-i\alpha/2}\sin\frac{1}{2}\beta\, e^{+i\gamma/2} \\ e^{+i\alpha/2}\sin\frac{1}{2}\beta\, e^{-i\gamma/2} & e^{+i\alpha/2}\cos\frac{1}{2}\beta\, e^{+i\gamma/2} \end{pmatrix} \tag{74}$$

(この式において，二つの行は順に $M=1/2$, $M=-1/2$ に対応する．列も左から右へ同じ順に並べられている)．

§ 13. J の整数値 ($J=l$)．球面調和関数の回転

$l=1$ の場合

$$r^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\beta) & -\frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta & \frac{1}{2}(1-\cos\beta) \\ \frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta & \cos\beta & -\frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta \\ \frac{1}{2}(1-\cos\beta) & \frac{1}{2}\sqrt{2}\sin\beta & \frac{1}{2}(1+\cos\beta) \end{pmatrix} \tag{75}$$

(この式において三つの行は $M=+1, 0, -1$ の順に並べられている．列も左から右へ同じ順に並べられている)．

球面調和関数の回転

$\omega \equiv (\theta, \varphi)$ は単位ベクトル $\boldsymbol{v}$ の四面体 $Oxyz$ に関する極角 ($v_1 = \sin\theta\cos\varphi$, $v_2 = \sin\theta\sin\varphi$, $v_3 = \cos\theta$)(*)．

$\Omega \equiv (\Theta, \Phi)$ は同じベクトル $\boldsymbol{v}$ の四面体 $OXYZ$ に関する極角．

$(\alpha\beta\gamma)$ は $Oxyz$ を $OXYZ$ まで動かす回転のオイラーの角(7)．

(*) ［訳注］ 直交座標系 $Oxyz$ に対して普通の方法で極座標系を定めると，任意の点 P は極座標 (r, θ, φ) で表わされる．このとき角の組 (θ, φ) はベクトル $\boldsymbol{v} = \overrightarrow{OP}$ の方向を表わす．これを原著では $\boldsymbol{v}$ の $Oxyz$ に関する極角 (angles polaires, 英語 polar angles) と呼んでいる．

(7) オイラーの角の選び方に関する任意性を除くために，条件

$$0 \leqslant \alpha \leqslant 2\pi, \qquad 0 \leqslant \beta \leqslant \pi, \qquad -\pi \leqslant \gamma \leqslant +\pi$$

を補う (この選び方によって，四面体 $OuzZ$ は右手系になる)．その結果

i) OZ の $Oxyz$ に関する極角は (β, α) であり，

ii) Oz の $OXYZ$ に関する極角は $(\beta, \pi-\gamma)$ である．

Θ と Φ は θ と φ の関数としてはっきり定められ，そのなかに α, β, γ がパラメータとして入ってくる．

回転 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ によって $\boldsymbol{v}$ に変換されるベクトル $\boldsymbol{v}_1 \equiv \mathcal{R}^{-1}\boldsymbol{v}$ の Oxyz に関する極角を $\omega_1 \equiv (\theta_1, \varphi_1)$ とするとき，$\omega_1 = \Omega$ が成り立つ．

球面調和関数 $Y_l^m(\omega)$ は表現 $\{\omega\}$ における一つのケットベクトル $|l\,m\rangle$ を表わす．すなわち

$$Y_l^m(\omega) = \langle \omega | l\,m \rangle.$$

回転 $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ によってこのケットはケット $R(\alpha\beta\gamma)|l\,m\rangle$ に変換される．$R(\alpha\beta\gamma)|l\,m\rangle$ の $\boldsymbol{v}$ 方向の成分は，$|l\,m\rangle$ の $\boldsymbol{v}_1$ 方向の成分に等しい．すなわち

$$Y_l^m(\Omega) \equiv \langle \omega_1 | l\,m \rangle = \langle \omega | R | l\,m \rangle.$$

これからつぎの球面調和関数の回転の公式が出てくる．

$$Y_l^m(\Omega) = \sum_{m'=-l}^{+l} Y_l^{m'}(\omega)\, R_{m'm}^{(l)}(\alpha\beta\gamma). \tag{76}$$

内積と加法定理

二つの単位ベクトル $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}'$ の Oxyz に関する極角をそれぞれ ω, ω' とし，OXYZ に関する極角を Ω, Ω' とする．関係 (76) と $R^{(l)}$ のユニタリ関係によって，

$$\sum_m Y_l^m(\Omega)\, Y_l^{m*}(\Omega') = \sum_m Y_l^m(\omega)\, Y_l^{m*}(\omega') \tag{77}$$

が得られる．

特に $\boldsymbol{v}'$ が OZ 方向を向いているとき，つぎの加法定理が得られる：

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, Y_l^0(\Omega) \equiv \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\Theta) = \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^m(\theta, \varphi)\, Y_l^{m*}(\beta, \alpha). \tag{78}$$

$r_{mm'}^{(l)}$ を $\cos\beta$ と $\sin\beta$ の関数として表わす式

l の整数値に対して

i) $(-)^{m+m'} = +1$ のとき $r_{mm'}^{(l)} = \cos\beta$ の l 次多項式．

ii) $(-)^{m+m'} = -1$ のとき $r_{mm'}^{(l)} = \sin\beta \times$ ($\cos\beta$ の $(l-1)$ 次多項式)．

特に

$$r_{ml}^{(l)}(\beta) = \sqrt{\frac{(2l)!}{(l+m)!\,(l-m)!}}\,\frac{1}{2^l}(1+\cos\beta)^m \sin^{l-m}\beta. \tag{79}$$

m または m' が 0 のとき $R_{mm'}^{(l)}$ を表わす式

$$R_{m0}^{(l)}(\alpha\beta\gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_l^{m*}(\beta\alpha) \tag{80 a}$$

$$R_{0m}^{(l)}(\alpha\beta\gamma) = (-)^m \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_l^{m*}(\beta\gamma) \tag{80 b}$$

$$R_{00}^{(l)}(\alpha\beta\gamma) = P_l(\cos\beta). \tag{80 c}$$

V. 既約テンソル演算子

§ 14. 定義と主な性質

定義

テンソル演算子 ≡ 回転によって互いに線形に変換される演算子の組．

既約テンソル演算子：

$$(2k+1) \text{ 個の演算子 } T_q^{(k)} \ (q=-k, \cdots, +k)$$

が回転の際，式

$$RT_q^{(k)}R^{-1} = \sum_{q'=-k}^{+k} T_{q'}^{(k)} R_{q'q}^{(k)} \tag{81}$$

にしたがって変換されるとき，$T_q^{(k)}$ は k 位の既約テンソル演算子 $\mathsf{T}^{(k)}$ の標準成分であると定義する．

ベクトル演算子 ≡ 1 位の既約テンソル演算子．$Oxyz$ に関するその成分を V_x, V_y, V_z とするとき，その標準成分は

$$V_+ = -\frac{1}{2}\sqrt{2}\,(V_x+\mathrm{i}\,V_y), \quad V_0 = V_z, \quad V_- = \frac{1}{2}\sqrt{2}\,(V_x-\mathrm{i}\,V_y).$$

スカラー演算子 ≡ 0 位の既約テンソル演算子．

J との交換関係

$$[J_\pm, T_q^{(k)}] = \sqrt{k(k+1)-q(q\pm 1)}\,T_{q\pm 1}^{(k)} \tag{82 a}$$

$$[J_z, T_q^{(k)}] = qT_q^{(k)}. \tag{82 b}$$

エルミート共役(8)

$$S_q^{(k)} = (-)^q T_{-q}^{(k)\dagger} \text{ のとき } \quad \mathsf{S}^{(k)} = \mathsf{T}^{(k)\dagger}. \tag{83}$$

基本性質（ウィグナー＝エッカルト）

$$\langle \tau JM|T_q^{(k)}|\tau' J' M'\rangle = \frac{(-)^{2k}}{\sqrt{2J+1}}\langle \tau J\|\mathsf{T}^{(k)}\|\tau' J'\rangle\langle J' k M' q|JM\rangle$$

$$= (-)^{J-M}\langle \tau J\|\mathsf{T}^{(k)}\|\tau' J'\rangle\begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}. \tag{84}$$

---

(8) ここで採用した定義は RACAH（前掲論文）によるものである．この定義によれば，与えられた位数 l の球面調和関数 Y_l^m はエルミート・テンソル演算子をつくる．交換する既約エルミート・テンソル演算子のテンソル積（のちに定義される）は必ずしもエルミートでないことに注意せよ．そうなるためには，エルミート共役の定義を修正し，$(-)^q$ を $(-)^{k+q}$ に置き換えなければならない．この新しい定義によれば，奇数位の球面調和関数は反エルミートである．

注意；$(-)^q$ は $e^{i\pi q}$ を意味すると規約すれば，エルミート共役に関するわれわれの定義は半整数位のテンソル演算子にもそのまま適用される．

この $\langle \tau J \| \mathsf{T}^{(k)} \| \tau' J' \rangle$ により，縮約行列の要素を定義する[9]．

つぎの共役関係が成り立つ（k は整数）：

$$\langle \tau J \| \mathsf{T}^{(k)} \| \tau' J' \rangle^* = (-)^{J'-J} \langle \tau' J' \| \mathsf{T}^{(k)\dagger} \| \tau J \rangle. \tag{85}$$

特殊なテンソル演算子

恒等演算子：

$$\langle \alpha J \| \alpha' J' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{JJ'} \sqrt{2J+1}.$$

全角運動量：

$$\langle \alpha J \| J \| \alpha' J' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{JJ'} \sqrt{J(J+1)(2J+1)}.$$

§ 15. 既約テンソル演算子のテンソル積[10]

定義

$\mathsf{T}^{(k_1)}, \mathsf{U}^{(k_2)}$ は既約テンソル演算子で，位数はそれぞれ k_1, k_2 とする．定義として―― $\mathsf{T}^{(k_1)} \otimes \mathsf{U}^{(k_2)} \equiv (2k_1+1)(2k_2+1)$ 個の演算子 $T_{q_1}^{(k_1)} U_{q_2}^{(k_2)}$ の全体（これらは必ずしも線形独立でない）．これは（可約な）テンソル演算子である．

K 位のテンソル積と呼ばれる $\mathsf{V}^{(K)} \equiv [\mathsf{T}^{(k_1)} \otimes \mathsf{U}^{(k_2)}]_K$ は，成分

$$V_Q^{(K)} = \sum_{q_1 q_2} \langle k_1 k_2 q_1 q_2 | K Q \rangle T_{q_1}^{(k_1)} U_{q_2}^{(k_2)} \tag{86}$$

によって定められる K 位の既約テンソル演算子のことである（必然的に $|k_1-k_2| \leqslant K \leqslant k_1+k_2$）．

$k_1 = k_2 = k$ のときには，つぎのように内積が定められる[11]：

$$S \equiv (\mathsf{T}^{(k)} \cdot \mathsf{U}^{(k)}) = \sum_q (-)^q T_q^{(k)} U_{-q}^{(k)}. \tag{87}$$

注意；$S = (-)^k \sqrt{2k+1} V_0^{(0)}$．

縮約行列の要素を表わす式

一つの量子系が二つの部分系1と2を合わせてつくられ，部分系はそれぞれ角運動量 $\boldsymbol{J}_1, \boldsymbol{J}_2$ をもつとする（$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2$）．

$|\tau_1 J_1 M_1 \rangle$ は系1の基底ベクトル．

$|\tau_2 J_2 M_2 \rangle$ は系2の基底ベクトル．

$\mathsf{T}^{(k_1)}, \mathsf{U}^{(k_2)}$ はそれぞれ系1，2の変数だけに作用する既約テンソル演算子．

$\mathsf{V}^{(K)}$ は定義 (86) による K 位のテンソル積．

---

(9) ここで採用した定義は Racah（前掲論文）によるものである．

(10) 今後現われるすべての公式において，テンソル演算子は整の位数をもつものに限る．

(11) この定義にしたがえば，二つのベクトル演算子の内積 $(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{W})$ は $V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z$ によって与えられ，普通の定義と一致する．

標準表現 $\{\tau_1\,\tau_2\,J_1^2\,J_2^2\,J^2\,J_z\}$ において，$\mathsf{V}^{(K)}$ の縮約行列の要素は結合公式によって与えられる．すなわち

$$\langle\tau_1\,\tau_2 J_1 J_2 J\|\mathsf{V}^{(K)}\|\tau'_1\,\tau'_2\,J'_1\,J'_2\,J'\rangle=\sqrt{(2J+1)\,(2K+1)\,(2J'+1)}$$
$$\times\begin{Bmatrix}J'_1 & J'_2 & J'\\ k_1 & k_2 & K\\ J_1 & J_2 & J\end{Bmatrix}\langle\tau_1 J_1\|T^{(k_1)}\|\tau'_1\,J'_1\rangle\langle\tau_2 J_2\|U^{(k_2)}\|\tau'_2 J'_2\rangle. \qquad (88)$$

《$9j$》記号が《$6j$》記号に還元される特殊な場合

1)　$\mathsf{U}=1,\ K=k_1=k.$

$$\langle\tau_1\,\tau_2 J_1 J_2 J\|\mathsf{T}^{(k)}\|\tau'_1\,\tau'_2\,J'_1\,J'_2 J'\rangle=\delta_{\tau_2\tau'_2}\delta_{J_2J'_2}\langle\tau_1 J_1\|\mathsf{T}^{(k)}\|\tau'_1\,J'_1\rangle$$
$$\times(-)^{J'+J_1+J_2+k}\sqrt{(2J+1)\,(2J'+1)}\begin{Bmatrix}J_1 & k & J'_1\\ J' & J_2 & J\end{Bmatrix}. \qquad (89)$$

2)　$\mathsf{T}=1,\ K=k_2=k.$

$$\langle\tau_1\,\tau_2 J_1 J_2 J\|\mathsf{U}^{(k)}\|\tau'_1\,\tau'_2\,J'_1\,J'_2\,J'\rangle=\delta_{\tau_1\tau'_1}\delta_{J_1J'_1}\langle\tau_2 J_2\|\mathsf{U}^{(k)}\|\tau'_2\,J'_2\rangle$$
$$\times(-)^{J+J_1+J'_2+k}\sqrt{(2J+1)\,(2J'+1)}\begin{Bmatrix}J_2 & k & J'_2\\ J' & J_1 & J\end{Bmatrix} \qquad (90)$$

3)　$K=0,\ k_1=k_2=k.$

$$\langle\tau_1\,\tau_2 J_1 J_2 J M|\,(\mathsf{T}^{(k)}\cdot\mathsf{U}^{(k)})\,|\tau'_1\,\tau'_2\,J'_1\,J'_2\,J'\,M'\rangle$$
$$=\delta_{JJ'}\,\delta_{MM'}\,(-)^{J+J_2+J'_1}\begin{Bmatrix}J_1 & k & J'_1\\ J'_2 & J & J_2\end{Bmatrix}\langle\tau_1 J_1\|\mathsf{T}^{(k)}\|\tau'_1\,J'_1\rangle\langle\tau_2 J_2\|\mathsf{U}^{(k)}\|\tau'_2\,J'_2\rangle. \qquad (91)$$

付録 D

群 論 の 初 歩

目　　次

§1. 序　　説

量子力学で研究される系の変化の方程式がある変換群に関して不変であること，あるいはもっと一般に，われわれの取り扱うオブザーバブルがこれらの群に関して特に簡単な変換の規則を満たすということがしばしば起こる．群論の方法によれば，このような対称性の存在から生じるいろいろな結果ならびに単純化を導き出すことができる．

実際には，演算子の取り扱いに際して十分な直観とある種の熟練とを駆使すれば，表面的には群の理論に訴えなくても，多くの場合対称性を活用することができる．優れた物理学者のうちにも，好んでこのような立場をとり，特殊な問題に当たって利用したいときには，群論の《よく知られた》結果でも自分で見つけることを辞さない人がかなり多い．しかし，物理学のいくつかの分野，たとえば多原子の分子や結晶の研究においては，必要な直観と熟練の程度があまり高くなるから，意識的に公然と群論を使うことが避けられない．系に含まれる対称性がそれほど複雑でないときには，群論の方法に頼ることが絶対必要というわけではないが，しばしばこれによって問題をいっそうよく整理し，その解決に役立ついくつかの要素を自動的に導き出すことができる．

この付録の目的は，読者を群論に親しませ，このテーマに関するもっと完全な著書に対して入門となる知識を読者に提供することにある(1)(*)．

ここに含まれるのは，量子力学に最も使われる主要な概念と性質に関する解説である．紙数が足りないから証明はほとんどすべて省略してある．それらのうちの大部分，特に第I節と第II節の証明は全部，大してむずかしいものではない．

---

(1) フランス語による初等的な解説は，E. Bauer, *Introduction à la Théorie des Groupes et à ses Applications à la Physique Quantique*, Presses Universitaires, Paris, 1933 によって与えられる．もっと完全な解説については，特に，E. P. Wigner, 前掲書（本書の付録C，注(2)）および（ドイツ語で書かれた）B. L. van der Waerden, *Die Gruppentheoretische Methode in der Quantenmechanik*, Edwards, Ann Arbor, Michigan, 1944 を見よ．連続群については，G. Racah, *Princeton Lecture Notes on Group Theory and Spectroscopy*, 1951 を見よ．

(*) ［訳注］ この付録は，かなりの内容を圧縮して記述してあるので，これだけではあまりわかりやすいとは言えない．興味をもたれる読者には，もっとていねいな解説書を読むことをお勧めする．わが国で入手しやすい群論の本は多数あるが，純数学的のものを除き，量子物理学や量子化学への応用を主にしたものをあげておく．

ウィグナー《群論と量子力学》森田正人・森田玲子訳，吉岡書店
山内恭彦《回転群とその表現》岩波書店
山内恭彦・杉浦光夫《連続群論入門》培風館
新楽和夫《化学者のための群論入門》共立出版
Jaffé・Orchin《群論入門——化学における対称》斎藤喜彦訳，東京化学同人
大岩正芳《群論と分子》化学同人
マヤンツ《分子振動論のための線型代数と対称群》柿木二郎・小倉淑訳，東京図書．

I．群についての一般論

§2. 定　　義

群

変換(*) $a, b, c, \cdots$ の集合 $\mathcal{G}$ が群をつくるのはつぎの条件が満たされるときである．

i） $\mathcal{G}$ に属する任意の二つの要素の積(*)がこの集合に属する．すなわち，

$$a \in \mathcal{G} \text{ で } b \in \mathcal{G} \quad \text{ならば} \quad ab \in \mathcal{G}$$ (2)(3).

ii） $\mathcal{G}$ の要素のうちの一つである I は単位要素である．すなわち，

$$I \in \mathcal{G} \text{ は任意の } a \in \mathcal{G} \text{ に対して} \quad Ia = aI = a.$$

iii） $\mathcal{G}$ のなかからどの一つの要素 a をとっても逆 a^{-1} があってこの集合に属する．すなわち，

$$a \in \mathcal{G} \text{ ならば } a^{-1} \in \mathcal{G} \text{ があって} \quad a^{-1}a = aa^{-1} = I.$$

iv） 積は結合法則を満たす．すなわち

$$(ab)c = a(bc).$$

有 限 群

有限個の要素から成る群である．要素の個数 N をこの群の位数という．

例：空間の反転から成る群は位数2の有限群である．二つの要素は，恒等変換 I と座標原点に関する反転 s であり，$s^2 = I$． n 個のものの置換全体から成る群 $\mathcal{S}_n$ は位数 $n!$ の有限群である．

連 続 群

無限に多くの要素を含み，一つまたはいくつかの連続なパラメータで表わされる群である．

例：空間の回転全体から成る群 $\mathcal{R}_3$，空間の並進全体から成る群．

(*) ［訳注］ 原著の opération をここでは“変換”と訳しておく．群の要素は何であってもよいが，著者は変換群をモデルとして解説しているからである．
　群 $\mathcal{G}$ の要素が変換として作用する対象は，一般に $\mathcal{G}$ とは別の空間（集合）である．$\mathcal{G}$ の要素のあいだに定められた演算（ここでは“積”と呼んでいる）と，$\mathcal{G}$ の要素そのものが表わす変換とを混同してはならない．

(2) $a \in \mathcal{G}$ とは，要素 a が $\mathcal{G}$ に属するという意味である，と規約する．

(3) ab で表わされる変換は，まず b を施し，その結果として得られたものに a を施すことである．ab と ba が異なることもありうる．

可換群（アーベル群）

どの二つの要素も交換するような群である．すなわち

$$\text{任意の } a, b \in \mathcal{G} \text{ に対して } ab = ba.$$

例：空間の反転群，空間の並進群，Oz のまわりの回転群．

§ 3.　群の共役類

共役要素

群 $\mathcal{G}$ の二つの要素 b と a に対して，

$$b = xax^{-1}$$

となるような $\mathcal{G}$ の要素 x が存在するとき，b は a に共役であるという（注意；x は一通りではない）．

b が a に共役ならば a は b に共役である．すなわち共役は相互的な関係である．また，b と c が同じ a に共役ならば，これらは互いに共役である(*)．

共役類

群 $\mathcal{G}$ の与えられた要素 a に共役な要素の全体は $\mathcal{G}$ の一つの共役類であると定義する．要素 a そのものもこのような集合に属する．

b に共役な要素のつくる共役類と a に共役な要素のつくる共役類とは，b が a に共役であるとき一致し，そうでないとき共通な要素を一つももたない．$\mathcal{G}$ の要素はそれぞれ一つの決まった共役類に属し，群の要素の全体は共役類の集まりに分けられる．

$\mathcal{G}$ の一つの要素が他のすべての要素と交換するとき，その要素だけで一つの共役類をつくる．特に，単位 I はこれだけで一つの類をつくる．

例：回転軸の向きは違っていても，同じ角 φ をもつ回転の全体 $\mathcal{R}(\varphi)$ は群 $\mathcal{R}_3$ の一つの共役類をつくる．角 φ $(0 \leqslant \varphi < \pi)$ の一つ一つに $\mathcal{R}_3$ の共役類が一つずつ対応する．

§ 4.　群の部分群

定　義

$\mathcal{H}$ が $\mathcal{G}$ の部分群であるというのは，$\mathcal{H}$ の要素がすべて $\mathcal{G}$ に属し，〔$\mathcal{G}$ の乗法に関して〕$\mathcal{H}$ が群をつくるときである．

例：Oz のまわりの回転の全体は $\mathcal{R}_3$ の部分群である．Oz に平行な並進の全体は，空間の並進群の部分群である．

(*)［訳注］ a が a に共役であることは言うまでもない．したがって共役関係は同値律を満たす．この関係によって集合 $\mathcal{G}$ を分類すれば，つぎの共役類が得られる．

剰　余　類

x を $\mathcal{G}$ の要素とするとき，部分群 $\mathcal{H}$ の各要素 h に要素 xh を対応させることができる．このような要素の全体を $x\mathcal{H}$ によって表わす．$\mathcal{H}$ の要素と $x\mathcal{H}$ の要素のあいだには一対一の対応がある．

ここでつぎの二つの場合が起こりうる．

a)　$x \in \mathcal{H}$ ならば，$x\mathcal{H}$ は部分群 $\mathcal{H}$ そのものである．

b)　$x \notin \mathcal{H}$ ならば，$x\mathcal{H}$ は群ではない．

$x\mathcal{H}$ は $\mathcal{H}$ に関する右剰余類と呼ばれる(*)．

同じようにして左剰余類 $\mathcal{H}x$ も定められる．今後は右剰余類だけを考えるけれども，当然のことながら左剰余類も同じ性質をもつ．

二つの剰余類 $x_1\mathcal{H}$ と $x_2\mathcal{H}$ は，$x_2^{-1}x_1$ が $\mathcal{H}$ に属するか属さないかによって，まったく同じ要素から成るか，または共通要素を一つも含まない．

$\mathcal{G}$ の任意の要素は $\mathcal{H}$ の剰余類の一つに属する．すなわち $\mathcal{G}$ は $\mathcal{H}$ の剰余類を合わせてつくられる．

$\mathcal{H}$ に共役な部分群

$\mathcal{H}$ が $\mathcal{G}$ の部分群で，x が $\mathcal{G}$ の要素であるとき，$x\mathcal{H}x^{-1}$ もまた $\mathcal{G}$ の部分群である．これは $\mathcal{H}$ に共役であると言う（注意；$x \in \mathcal{H}$ ならば $x\mathcal{H}x^{-1}$ は $\mathcal{H}$ そのものである）．

$\mathcal{H}$ に共役な部分群は必ずしも $\mathcal{H}$ と異ならず，また互いに異なるとは限らない．

不変部分群．商群

$\mathcal{H}$ がそれに共役なすべての部分群に一致するとき，すなわち

$$\text{任意の } x \in \mathcal{G} \text{ に対して} \qquad \mathcal{H} = x\mathcal{H}x^{-1}$$

が成り立つとき，$\mathcal{H}$ は $\mathcal{G}$ の不変部分群（または正規部分群）と呼ばれる．

同値な定義：$\mathcal{G}$ の部分群の要素が，一つまたはいくつかの共役類に属する要素の全体と一致するとき，この部分群は不変である．

注意；与えられた群の不変部分群をすべて求めようとするとき，この第二の定義は大そう役に立つ．

$\mathcal{H}$ が不変部分群であるとき，$\mathcal{H}$ に関する剰余類の二つを $x\mathcal{H}, y\mathcal{H}$ とすれば，$y\mathcal{H}$ の要素と $x\mathcal{H}$ の要素との積は，剰余類 $(yx)\mathcal{H}$ に属する．すなわち

$$(y\mathcal{H})(x\mathcal{H}) = (yx)\mathcal{H}$$

(*)［訳注］原著では b) の場合だけを complexe associé à gauche au sous-groupe $\mathcal{H}$（部分群 $\mathcal{H}$ に左から結びつけられた複体）と呼んでいる．ここでは群論の普通の用語にしたがい，a) の場合も b) の場合も含めて $x\mathcal{H}$ を“右剰余類”と言っておく．

(注意；$\mathcal{H}$ が不変部分群ならば $x\mathcal{H} = \mathcal{H}x$).

不変部分群 $\mathcal{H}$ に関する剰余類〔の一つ一つを要素とみなすとき，それらの全体〕から成る集合は群をつくり，その単位要素は $\mathcal{H}$ である．この群を商群 $\mathcal{G}/\mathcal{H}$ という．

例：n 個のものの偶置換の全体から成る群 $\mathcal{A}_n$ は $\mathcal{S}_n$ の不変部分群である．$\mathcal{A}_n$ に関する剰余類は $\mathcal{A}_n$ のほかにただ一つ，奇置換の全体しかない．それゆえ商群は二つの要素から成る．

単純群．半単純群

一つの群が不変部分群として〔その群自体のほかには〕単位要素だけから成る群しかもたないとき，この群は単純であるという．

例：空間の回転群．

一つの群が単位要素だけから成る群のほかに可換不変部分群をもたないとき，この群は半単純であるという．

例：群 $\mathcal{S}_n$.

§ 5.　同型．準同型

同　　型

二つの群 $\mathcal{G}$ と $\hat{\mathcal{G}}$ が同型であるというのは，それらの要素のあいだに一対一の対応がつけられ，この対応が乗法の規則を保存するとき，すなわちつぎのことが成り立つときである．

i）　$\mathcal{G}$ の各要素 g_i に $\hat{\mathcal{G}}$ の要素 $\hat{g}_i$ がつねにただ一つ対応し，その逆も成り立つ．

ii）　$g_i g_j = g_k$ ならば $\hat{g}_i \hat{g}_j = \hat{g}_k$.

例：正三角形の合同操作がつくる群と $\mathcal{S}_3$ とは同型である(*)．正四面体の合同操作がつくる群と $\mathcal{S}_4$ とは同型である．

(*)［訳注］一様で裏も表も同じにつくられた正三角形の板を考える．中心を通って板に垂直な直線のまわりでこの板を $2\pi/3, 4\pi/3$ だけ回転すると，もととまったく区別のつかない状態になる．一頂点と中心を通る直線のまわりでの π だけの回転でも同様である．このような操作のことを，合同操作 (symmetry operation) という．

準 同 型

$\mathcal{G}$ と $\hat{\mathcal{G}}$ の要素のあいだの対応が一対一でないときには，これらの群の一方が他方に準同型である．もっと正確には，つぎの条件が満たされるとき，$\mathcal{G}$ は $\hat{\mathcal{G}}$ に〔普通は $\hat{\mathcal{G}}$ が $\mathcal{G}$ に〕準同型であるという．

i） $\mathcal{G}$ の各要素 g_i には $\hat{\mathcal{G}}$ の要素 $\hat{g}_i$ がただ一つだけ対応し，$\hat{\mathcal{G}}$ の各要素 $\hat{g}_i$ には，この対応によって $\hat{g}_i$ に移される $\mathcal{G}$ の要素が少なくとも一つ（一般には一つ以上）存在する．

ii） $g_i g_j = g_k$ ならば $\hat{g}_i \hat{g}_j = \hat{g}_k$.

$\mathcal{G}$ が不変部分群 $\mathcal{H}$ をもつとき，$\mathcal{G}$ は商群 $\mathcal{G}/\mathcal{H}$ に準同型である．

$\mathcal{G}$ が $\hat{\mathcal{G}}$ に準同型ならば，この対応によって $\hat{\mathcal{G}}$ の単位 $\hat{1}$ に移される $\mathcal{G}$ の要素の全体を $\mathcal{H}$ とするとき，$\mathcal{H}$ は $\mathcal{G}$ の不変部分群であり，$\hat{\mathcal{G}}$ の与えられた要素に移される $\mathcal{G}$ の要素の全体は，この部分群に関する剰余類の一つである．そして商群 $\mathcal{G}/\mathcal{H}$ は $\hat{\mathcal{G}}$ に同型である．

II．群の（線形）表現

§ 6. 定　　義

線形変換群

（正方）行列の掛け算は結合法則を満たす演算である．$n \times n$ 型の行列から成る一つの集合が群の定義の公理 i)，ii)，iii) を満たすとき，それは一つの群 G をつくる．

どの行列も n 次元ベクトル空間 $\mathcal{E}_n$ においてある線形演算子 G を表わし，したがってこの空間のベクトルに対する線形変換を定める．この空間の n 個の基底ベクトルを $|1\rangle$, $|2\rangle, \cdots, |n\rangle$ とするとき（この基底は直交規格化されていなくてもよい），これらの一つ一つに対する変換は式

$$G|k\rangle = \sum_j |j\rangle G_{jk}$$

によって与えられる．

ここで定義した型の群を（n 次元）線形変換群と名づけ，今後はこれを太いローマ字で表わす．

群 の 表 現

群 $\mathcal{G}$ が一つの線形変換群に準同型であるとき，この線型変換群は $\mathcal{G}$ の（線形）表現であると定義する．

G をこのような表現であるとし，G の行列が作用するベクトル空間を $\mathcal{E}$ とする．$\mathcal{E}$ は

表現空間，$\mathcal{E}$ の次元 n は表現の次数と呼ばれる．

$\mathcal{G}$ が G に同型であるとき，この表現は忠実であるという．そうでないときは，行列1に移される $\mathcal{G}$ の要素の全体を $\mathcal{H}$ とすれば，これは不変部分群であり，G は商群 $\mathcal{G}/\mathcal{H}$ の忠実な表現である．

1次の表現

どんな群も1次の表現を少なくとも一つはもつ．それは恒等表現であり，この群の各要素は数1で表現される．

このほかに1次の表現をもつためには，商群が可換になるような不変部分群をもたなければならない．1次の表現はすべて可換商群の表現である（§17, $\mathcal{S}_n$ の場合を参照）．

ユニタリ表現

表現 G の行列がすべてユニタリであるとき，G はユニタリ表現であるという．

同値な表現

二つの表現 G, G′ が同じ次数をもち，G′ の各行列 $G'(g)$ が群 $\mathcal{G}$ の同じ要素を表現する G の行列 $G(g)$ からある一つの線形変換 T によって導き出されるとき，すなわち

$$\text{任意の } g \in \mathcal{G} \text{ に対して} \qquad G'(g) = TG(g)T^{-1}$$

が成り立つとき，G と G′ は同値であるという．このことをまた

$$\mathsf{G}' = T\mathsf{G}T^{-1}$$

で表わす．

記号では

$$\mathsf{G}' \simeq \mathsf{G}$$

と書かれる．

表現空間 $\mathcal{E}$ と $\mathcal{E}'$ を同一視するならば，表現 G から同値な表現 G′ への移行は，この空間の基底ベクトルの変換に相当する．

共役な表現

二つの表現 G, G* に属する行列 $G(g), G^*(g)$ が互いに複素共役であるとき，G と G* は共役であるという．

表現 G がその共役と同値であるとき，すなわち $\mathsf{G} \simeq \mathsf{G}^*$ であるとき，G は自己共役であるという．

指　　標

$\mathcal{G}$ の表現 G において，要素 g を表わす行列 $G(g)$ の跡を，この表現における g の指標 χ という．すなわち

$$\chi(g) \equiv \mathrm{Tr}\, G(g).$$

跡の性質により，同じ共役類に属する二つの要素は同じ指標をもつ．すなわち，指標は

共役類の関数である．

同じ理由により，同値な二つの表現は同じ指標系をもつ．すなわち，

$$G'(g) = TG(g)T^{-1} \qquad \text{ならば} \qquad \chi'(g) = \chi(g).$$

記号では

$$\mathsf{G}' \simeq \mathsf{G} \qquad \text{のとき} \qquad \chi' = \chi$$

と書かれる．

注意；G が自己共役ならば，その指標は実数である．

§7.　表現空間に対する演算．可約性[4]

直　和

$\mathsf{G}^a, \mathsf{G}^b$ は同じ群 $\mathcal{G}$ の二つの表現であり，次数はそれぞれ n_a, n_b，表現空間はそれぞれ $\mathcal{E}_a, \mathcal{E}_b$ とする．

$|a1\rangle, |a2\rangle, \cdots, |an_a\rangle$ を $\mathcal{E}_a$ の基底ベクトル，$|b1\rangle, \cdots, |bn_b\rangle$ を $\mathcal{E}_b$ の基底ベクトルとすれば，上記の表現において変換 g を表わす線形変換はそれぞれつぎのような基底ベクトルの変換法則によって定められる．

$$g[|a\kappa\rangle] = \sum_\lambda |a\lambda\rangle G^a_{\lambda\kappa}(g), \qquad g[|b\mu\rangle] = \sum_\nu |b\nu\rangle G^b_{\nu\mu}(g). \tag{1}$$

定義によれば，空間 $\mathcal{E}_a$ と $\mathcal{E}_b$ の直和 $\mathcal{E}_a \dotplus \mathcal{E}_b$ は $(n_a + n_b)$ 個のベクトル $|a1\rangle, \cdots, |an_a\rangle, |b1\rangle, \cdots, |bn_b\rangle$ によって張られる空間である．

この新しい空間の行列は

$$M \equiv \begin{pmatrix} M_{aa} & M_{ab} \\ M_{ba} & M_{bb} \end{pmatrix}$$

という形に表わされる．M_{aa} は空間 $\mathcal{E}_a$ のベクトルを $\mathcal{E}_a$ のベクトルに変換する $n_a \times n_a$ 型の行列，M_{bb} は空間 $\mathcal{E}_b$ のベクトルを $\mathcal{E}_b$ のベクトルに変換する $n_b \times n_b$ 型の行列，M_{ab} は空間 $\mathcal{E}_b$ のベクトルを空間 $\mathcal{E}_a$ のベクトルに変換する $n_a \times n_b$ 型の行列，M_{ba} は逆の性質をもつ $n_b \times n_a$ 型の行列である．特に，A が空間 $\mathcal{E}_a$ の行列で，B が $\mathcal{E}_b$ の行列であるとき，これらの直和としてつぎのような形の行列 $A \dotplus B$（ブロック対角型の行列）をつくることができる．

$$A \dotplus B = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}.$$

ここで

$$\mathrm{Tr}\,(A \dotplus B) = \mathrm{Tr}\,A + \mathrm{Tr}\,B, \qquad \det\,(A \dotplus B) = \det A \det B \tag{2}$$

---

(4)　この§7で述べられる性質は，一対一の対応にある行列の系がもつ一般的な性質である．これらの行列系が群をつくらないときにも，以下の性質は成り立つ．

に注意する.

行列に関する直和の演算は単位および行列の乗法規則を保存する. すなわち,

$$1_{(a+b)} = 1_{(a)} + 1_{(b)}, \qquad (A_1 + B_1)(A_2 + B_2) = A_1A_2 + B_1B_2.$$

したがって, 行列 $G^a(g) + G^b(g)$ の全体を G^{a+b} とすれば, G^{a+b} も群 $\mathcal{G}$ の表現である. この表現において変換 g を表わす線形変換は, $\mathcal{E}_a + \mathcal{E}_b$ の $(n_a + n_b)$ 個の基底ベクトルに対する変換法則(1)によって定められる. この表現の指標については, $\chi^{a+b}(g) = \chi^a(g) + \chi^b(g)$ が成り立つ. 言いかえれば,

$$\chi^{a+b} = \chi^a + \chi^b. \tag{3}$$

テンソル積(またはクロネッカー積)

空間および行列のテンソル積という演算はすでに定義されている(第7章).

$\mathcal{E}_a$ と $\mathcal{E}_b$ のテンソル積をとれば, $|ab\kappa\mu\rangle \equiv |a\kappa\rangle|b\mu\rangle$ $(\kappa = 1, 2, \cdots, n_a;\ \mu = 1, 2, \cdots, n_b)$ を基底ベクトルとする n_an_b 次元の空間 $\mathcal{E}_a \otimes \mathcal{E}_b$ ができる. G^a および G^b において g を表わす行列のテンソル積としてつくられる行列 $G^a(g) \otimes G^b(g)$ は, 群 $\mathcal{G}$ の n_an_b 次の表現 $\mathrm{G}^{ab} \equiv \mathrm{G}^a \otimes \mathrm{G}^b$ をつくる. この表現において, 与えられた $\mathcal{G}$ の変換 g は法則

$$g[|ab\kappa\mu\rangle] = \sum_{\lambda\nu} |ab\lambda\nu\rangle G^a_{\lambda\kappa}(g)\, G^b_{\nu\mu}(g) \tag{4}$$

によって定められる. この表現の指標は関係式

$$\chi^{ab}(g) = \chi^a(g)\chi^b(g) \tag{5}$$

によって与えられる.

可　約　性

表現 G に関する空間 $\mathcal{E}$ の<u>不変部分空間</u>とは, $\mathcal{E}$ の部分空間であって, そのベクトルに G の行列を適用すれば, 同じ部分空間のベクトルに変換される場合である.

表現 G についてつぎのように言われる.

i) $\mathcal{E}$ が(それ自体と零空間のほかには)不変部分空間を含まないとき, G は<u>既約,</u>

ii) そうでないとき, すなわち

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 \ (\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2 \neq 0), \ \mathcal{E}_1 \text{ は不変部分空間}$$

であるとき, G は<u>可約</u>である.

第二の場合, $\mathcal{E}_2$ もまた不変ならば, G は<u>分解可能</u>である. このときは適当な線形変換によって $\mathcal{E}$ の基底ベクトルを変換し, これらが $\mathcal{E}_1$ または $\mathcal{E}_2$ に含まれるようにすることができる. こうして得られた同値な表現は, 空間 $\mathcal{E}_1$ における表現 G_1 と空間 $\mathcal{E}_2$ における表現 G_2 の直和になる. すなわち

$$\mathrm{G} \simeq \mathrm{G}_1 + \mathrm{G}_2.$$

G_1 と G_2 は G の<u>成分</u>と呼ばれる.

表現 G が<u>完全可約</u>であるというのは, それが既約成分の(直)和

$$\mathrm{G} \simeq \mathrm{G}^{(1)} + \mathrm{G}^{(2)} + \cdots \qquad (\mathrm{G}^{(1)}, \mathrm{G}^{(2)}, \cdots \text{は既約})$$

の形に表わされるときである．

任意のユニタリ表現は既約であるかまたは完全可約である．

与えられた j の値に関する回転の行列 $R^{(j)}$（付録C，第IV節）の全体は，一つの群の既約ユニタリ表現 $\mathrm{D}^{(j)}$ をつくる．厳密に言えば，$\mathrm{D}^{(j)}$ が回転群 $\mathcal{R}_3$ を表現するのは j が整数のときだけである．任意の j に対して，$\mathrm{D}^{(j)}$ は $\mathcal{R}_3$ と同じ無限小変換をもつ一つの群（$\mathcal{R}_3$ の《被覆群》）の既約表現になっている．それは2次元ユニモジュラ・ユニタリ線形変換群 $\mathcal{U}_2$ であり，$\mathcal{R}_3$ はその剰余群である．j が半整数であるとき，$\mathrm{D}^{(j)}$ は $\mathcal{U}_2$ の忠実な表現であり，$\mathcal{R}_3$ の各要素に $\mathrm{D}^{(j)}$ の行列が二つ対応し，それらは反対の符号をもつ．

可換群の既約表現はすべて1次である．

一つの表現空間から他の表現空間への準同型写像

$\mathcal{E}_a$ の各ベクトル $|a\rangle$ に $\mathcal{E}_b$ のベクトル $|b\rangle$ が一つだけ対応し，この対応が線形であるとき，$\mathcal{E}_a$ から $\mathcal{E}_b$ への線形写像が得られる．群 $\mathcal{G}$ に属する各変換によってベクトルを変換する規則がこの写像によって保存されるとき，この写像は準同型であるという．すなわち

$$\text{対応} \qquad |a\rangle \longrightarrow |b\rangle$$

が成り立つならば

$$\text{任意の } g \in \mathcal{G} \text{ に対して対応 } g[|a\rangle] \longrightarrow g[|b\rangle]$$

が成り立つ場合である．

$\mathcal{E}_a$ から $\mathcal{E}_b$ への写像を完全に決定するには，$\mathcal{E}_a$ の各基底ベクトルに対応する $\mathcal{E}_b$ のベクトルを定める $n_b \times n_a$ 型の行列 S がわかればよい．すなわち

$$|a\kappa\rangle \longrightarrow \sum_{\mu} |b\mu\rangle S_{\mu\kappa}. \qquad (6)$$

写像が準同型ならば，行列のあいだの等式

$$\text{任意の } g \in \mathcal{G} \text{ に対して} \qquad SG^a(g) = G^b(g)S$$

すなわち次式が成り立つ．

$$S\mathrm{G}^a = \mathrm{G}^b S. \qquad (7)$$

$\mathcal{E}_a$ のベクトルに対応するベクトル $|b\rangle$ の集合が $\mathcal{E}_b$ の全空間を張るとき（この場合 $n_a \geqslant n_b$ である），この対応は $\mathcal{E}_a$ から $\mathcal{E}_b$ の上への写像である（$\mathcal{E}_b$ 全体への写像を意味する〔全射〕）．この場合，S に含まれる n_b 次小行列式はいずれも0でない．

さらにこの対応が一対一であるとき（$n_a = n_b$），行列 S は非特異，すなわち $\det S \neq 0$ である．この場合，$\mathcal{E}_a$ から $\mathcal{E}_b$ の上への準同型写像は同型対応と呼ばれ，明らかに

$$\mathrm{G}^a \simeq \mathrm{G}^b$$

が成り立つ.

§ 8.　基本的な諸定理

群論を量子力学に応用するとき，その基礎となるのは本質的につぎの諸定理である.

シューアの補助定理

G^a と G^b が同じ群の既約表現であり，一方の空間から他方の空間への準同型写像が存在するとき，この写像を定める行列 S（これは等式（6）と（7）を満たす）はつぎの性質をもつ：

a)　G^a と G^b が同値でなければ，必ず $S = 0$.

b)　$G^a \simeq G^b$ ならば，$S = 0$ または $\det S \neq 0$.

c)　$G^a \equiv G^b$ ならば，S は単位行列の定数倍，すなわち $S = c1$（c は定数）.

系

一つの（正方）行列 S が，ある群の一つの既約表現 G に属するすべての行列と交換するとき，S は単位行列の定数倍である．すなわち，

$$[S, G] = 0 \quad \text{ならば必ず} \quad S = c1.$$

完全可約表現．一意性の定理

完全可約表現 G の既約成分への分解が二通りあって，それらを

$$G \simeq G_1 + G_2 + \cdots + G_p, \qquad G \simeq G'_1 + G'_2 + \cdots + G'_{p'}$$

とする．このとき，$p = p'$ で，第一の分解に属する各項に対して，第二の分解に属する項を一対一に対応させることができ，対応する項は互いに同値であることが示される．言いかえると，

一意性の定理． G が完全可約ならば，その既約分解は同値関係を除いて一通りである.

今後は特に断わらない限り，互いに同値な二つの表現は異なるものとみなさない．この条件のもとで，同じ既約表現が表現 G のなかに何回も現われることが起こりうる．群 $\mathcal{G}$ の〔同値でない〕既約表現の列を

$$G^{(1)}, G^{(2)}, \cdots, G^{(j)}, \cdots$$

で表わす．一意性の定理によれば，任意の完全可約表現 G は同値の法則

$$G \simeq \sum_j n_j G^{(j)} \tag{8}$$

にしたがい，整数（$\geqslant 0$）$n_1, n_2, \cdots, n_j, \cdots$ の列は一通りに定められる．また，G の指標の系は等式

$$\chi = \sum_j n_j \chi^{(j)} \tag{9}$$

にしたがう.

一意性の定理を補うものとして，つぎの二つの定理がある．

定理II． Gが完全可約であるとき，Gの任意の成分 G_1 も完全可約であり，その既約成分への分解は，Gの既約成分のうちのいくつかのものの和である．

それゆえ，$G \simeq G_1 + G_2$ で，Gが（8）のように分解されるならば，

$$G_1 \simeq \sum_j n_j^1 G^{(j)} \qquad \text{ただし } n_j^1 \leqslant n_j \ (j = 1, 2, \cdots).$$

定理III． Gが完全可約であるとき，Gの空間 $\mathcal{E}$ から，同じ群の別の表現 G_1 の空間 $\mathcal{E}_1$ の上への準同型写像が存在すれば，G_1 はGの成分の一つである．

特に定理IIIが適用されるのはつぎの場合である——空間 $\mathcal{E}$ の各基底ベクトル $|\kappa\rangle$ から空間 $\mathcal{E}_1$ のベクトル $|\hat{\kappa}\rangle$ への対応が与えられ，ベクトル $|\hat{\kappa}\rangle$ の全体は線形独立でなくてもよいが $\mathcal{E}_1$ 全体を張り，群によるベクトル $|\hat{\kappa}\rangle$ の線形変換は $|\kappa\rangle$ の線形変換と同じ係数行列によって表わされる．すなわち

$$g[|\hat{\kappa}\rangle] = \sum_\lambda |\hat{\lambda}\rangle G_{\lambda\kappa}(g)$$

となる場合である．このとき，対応 $|\kappa\rangle \to |\hat{\kappa}\rangle$ が $\mathcal{E}$ から $\mathcal{E}_1$ の上への準同型写像となっていることは明らかである．

特に，

系III． それぞれ表現 G^a と G^b に結びついた二つの空間が，それぞれベクトル $|a\kappa\rangle$（κ は変数）およびベクトル $|b\mu\rangle$（μ は変数）によって張られ，これら二つの表現のテンソル積 G^{ab} が完全可約であるならば，積ベクトル $|a\kappa\rangle|b\mu\rangle$ が張る空間で定義された表現 G' は G^{ab} の成分の一つである．

注意；これらのベクトル $|a\kappa\rangle|b\mu\rangle$ は必ずしも線形独立でない．線形独立のときは，$G' \simeq G^{ab}$．

§9. 量子論への応用

量子論に現われる群は状態空間の変換群である．われわれが取り扱うのはほとんどつねに線形ユニタリ変換であるから，今後はこの型の変換に限ることにする．

状態空間を $\mathcal{E}$ で表わし，ユニタリ演算子 $G_1, G_2, \cdots$ から成る一つの集合 $\mathcal{G}$ が群をつくるとする．

$\mathcal{E}$ の一つのベクトルを $|u\rangle$ とする．$|u\rangle$ に群の演算子を適用して得られるベクトル $G_1|u\rangle, G_2|u\rangle, \cdots$ の全体は，全空間 $\mathcal{E}$ を張るとは限らないけれども，状態空間のある部分空間 $\mathcal{E}_u$ を張る．これは群の変換に関して不変な部分空間であり，群 $\mathcal{G}$ のあるユニタリ表現 G^u に結びつけられる（G^u はユニタリであるから完全可約である）．ベクトル $|u\rangle$ は G^u にしたがって変換するといわれる．

同様に，空間 $\mathcal{E}$ の線形演算子の一つを Q とすれば，群の変換によってこれから導かれる演算子 $G_1QG_1^{-1}, G_2QG_2^{-1}, \cdots$ の全体はベクトル空間 $\mathcal{E}_Q$（この空間のベクトルは演算子である）を張り，$\mathcal{E}_Q$ の要素は群の演算を適用することによって互いに線形に変換される．$\mathcal{E}_Q$ は $\mathcal{G}$ の一つの表現 G^Q に結びつけられ，われわれが調べる例についてはいつでも G^Q は完全可約であるかまたは既約である．Q は G^Q にしたがって変換されるという．

演算子 Q が恒等表現にしたがって変換されるとき，Q は $\mathcal{G}$ に関して不変であると定義する．このとき Q は群のすべての演算子と交換する．もっと一般に，Q が群 $\mathcal{G}$ の既約表現 $\mathrm{G}^{(j)}$ にしたがって変換されるとき，演算子 Q は群 $\mathcal{G}$ の既約テンソル演算子の成分であるという．

既約部分空間 $\mathcal{E}(\tau j)$．群 $\mathcal{G}$ に適合する表現

空間 $\mathcal{E}$ は d_j 次元の既約不変部分空間 $\mathcal{E}(\tau j)$ の直和である．これらの一つ一つは $\mathcal{G}$ のある既約表現 $\mathrm{G}^{(j)}$ に結びつけられる．添字 τ は同じ既約表現に結びつけられる部分空間を互いに区別するために用いられる．

$\mathcal{E}(\tau j)$ の基底系をつくる d_j 個のベクトルを $|\tau j\mu\rangle$（μ は変数）とする．$\mathrm{G}^{(j)}$ は同値関係を除いて定まるのであるから，この基底の選び方はまったく任意である．この任意さを取り除くために，$\mathcal{E}(\tau j)$ の標準基底を定めて動かさないことにし，この基底に関しては，群の各演算子が一定の行列 $G_{\lambda\mu}^{(j)}$ で表わされるようにするとつごうがよい．すなわち

$$G|\tau j\mu\rangle = \sum_{\lambda=1}^{d_j} |\tau j\lambda\rangle G_{\lambda\mu}^{(j)}. \tag{10}$$

以下の議論では，いつでもこの標準的な選び方がなされていると仮定する．

ベクトル $|\tau j\mu\rangle$（τ, j, μ は変数）全体の集合は空間 $\mathcal{E}$ の基底系をつくる．今後は表現 $\{\tau j\mu\}$ を群 $\mathcal{G}$ に適合する標準表現と呼ぶことにしよう．ここで表現という言葉は量子力学における慣用の意味に用いられる．群 $\mathcal{G}$ の変換によるケットベクトルおよび演算子の変換法則は，この表現におけるこれらの成分を用いると，特に簡単な性質に言いなおされる．これらの性質はつぎの二つの定理に要約される．

表現 $\{\tau j\mu\}$ におけるケットベクトルと演算子の成分

定理A． ベクトル $|u1\rangle, \cdots, |u\nu\rangle, \cdots$ がユニタリ表現 G^a の基底ベクトルのように互いに線形に変換されるとき，すなわち

$$G|u\nu\rangle = \sum_{\rho} |u\rho\rangle G_{\rho\nu}^a$$

であるとき，それらの成分 $\langle\tau j\mu|u\nu\rangle$ はつぎの性質をもつ：

1°　G^a の既約成分への分解

$$\mathrm{G}^a \simeq \sum_k n_k \mathrm{G}^{(k)} \tag{11}$$

のなかに $\mathrm{G}^{(j)}$ が現われないならば，必ず

$$\langle \tau j\mu | u\nu \rangle = 0.$$

2° $G^{(j)}$ が現われるならば，$\langle a\nu|\sigma k\chi\rangle$ がこの分解をひき起こす行列であるとき，

$$\langle \tau j\mu | u\nu \rangle = \sum_{\sigma=1}^{n_j} u^j_{\tau\sigma} \langle a\nu | \sigma j\mu \rangle^*. \tag{12}$$

ただし $u^j_{\tau\sigma}$ は μ と ν に無関係な n_j 個の定数である．

定理 B. 演算子 $Q_1, Q_2, \cdots, Q_\nu, \cdots$ がユニタリ表現 G^a の基底ベクトルのように互いに線形に変換されるとき，すなわち

$$GQ_\nu G^{-1} = \sum_\rho Q_\rho G^a_{\rho\nu}$$

であるとき，行列要素 $\langle \tau_1 j_1 \mu_1 | Q_\nu | \tau_2 j_2 \mu_2 \rangle$ はつぎの性質をもつ：

1° テンソル積 $G^a \otimes G^{(j_2)}$ の既約成分への分解

$$G^a \otimes G^{(j_2)} \simeq \sum_k n_k^{aj_2} G^{(k)} \tag{13}$$

のなかに $G^{(j_1)}$ が現われないならば，必ず

$$\langle \tau_1 j_1 \mu_1 | Q_\nu | \tau_2 j_2 \mu_2 \rangle = 0.$$

2° $G^{(j_1)}$ が現われるならば，$\langle a j_2 \nu \mu_2 | \sigma k\chi \rangle$ がこの分解をひき起こす行列であるとき，

$$\langle \tau_1 j_1 \mu_1 | Q_\nu | \tau_2 j_2 \mu_2 \rangle = \sum_\sigma \langle \tau_1 j_1 \| Q \| \tau_2 j_2 \rangle_\sigma \langle a j_2 \nu \mu_2 | \sigma j_1 \mu_1 \rangle^*, \tag{14}$$

ただし $\langle \tau_1 j_1 \| Q \| \tau_2 j_2 \rangle_\sigma$ は μ_1, μ_2, ν に無関係な $n_{j_1}^{aj_2}$ 個の定数であり，σ についての和は1から $n_{j_1}^{aj_2}$ までとるものとする．

重要な注意

これら二つの定理に現われたユニタリ行列の要素 $\langle a\nu|\sigma k\chi\rangle, \langle a j_2 \nu \mu_2 | \sigma k\chi \rangle$ は定義式

$$\sum_{\nu\nu'} \langle a\nu | \sigma k\chi \rangle^* G^a_{\nu\nu'} \langle a\nu' | \sigma' k' \chi' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'} G^{(k)}_{\chi\chi'}, \tag{15 a}$$

$$\sum_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}} \langle a j\nu\mu | \sigma k\chi \rangle^* G^a_{\nu\nu'} G^{(j)}_{\mu\mu'} \langle a j \nu' \mu' | \sigma' k' \chi' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'} G^{(k)}_{\chi\chi'} \tag{15 b}$$

を満たす．これらは表現 $G^a, G^a \otimes G^{(j)}$ を与えれば曖昧さを残さずに決まる．したがってこれらは，群 $\mathcal{G}$ の変換によってベクトル $|u\nu\rangle$ あるいは演算子 Q_ν がどのように変換されるかということにだけ依存し，その他のすべての性質に無関係である．

定理 A の証明

ユニタリ変換 $\langle a\nu|\sigma k\chi\rangle$ を基底ベクトル $|u1\rangle, |u2\rangle, \cdots, |u\nu\rangle, \cdots$ に適用すると，これらのベクトルが張る空間のなかに，新しい基底ベクトル系

$$|u\sigma k\chi\rangle = \sum_\nu |u\nu\rangle \langle a\nu | \sigma k\chi \rangle \tag{16}$$

が得られる．またユニタリ関係により

$$|u\nu\rangle = \sum_{\sigma k\chi} |u\sigma k\chi\rangle \langle a\nu | \sigma k\chi \rangle^*. \tag{17}$$

このユニタリ変換の定義そのものにより，d_k 個のベクトル $|u\sigma k\chi\rangle$ (σ, k は固定，χ は変

数）はある部分空間 $\mathcal{E}_u(\sigma k)$ を張り，この部分空間において表現 $\mathrm{G}^{(k)}$ の標準基底をつくる．これらを基底 $\{\tau j\mu\}$ によって展開すれば，

$$|u\sigma k\chi\rangle=\sum_{\tau j\mu}|\tau j\mu\rangle\langle\tau j\mu|u\sigma k\chi\rangle.$$

行列 $\langle\tau j\mu|u\sigma k\chi\rangle$（$\mu$ と χ は変数，その他は固定）は d_j 行 d_k 列であり，$\mathcal{E}_u(\sigma k)$ から $\mathcal{E}(\tau j)$ への準同形写像を与える．これらの部分空間の表現は同値でないかまたは等しいから，シューアの補助定理により，

$$\langle\tau j\mu|u\sigma k\chi\rangle=\delta_{jk}\delta_{\mu\chi}u^j_{\tau\sigma} \tag{18}$$

となり，この式のなかの $u^j_{\tau\sigma}$ は μ に無関係な定数である．この結果を考えに入れて，等式（17）の両辺を $|\tau j\mu\rangle$ に射影すれば，

$$\langle\tau j\mu|u\nu\rangle=\sum_{k\chi}\delta_{jk}\delta_{\mu\chi}\left(\sum_\sigma u^j_{\tau\sigma}\langle a\nu|\sigma k\chi\rangle^*\right)$$

が得られる．定理Aに述べた二つの性質はこの等式のなかに含まれている．（証明終）

定理 B の証明

ベクトル $Q_\nu|\tau_2j_2\mu_2\rangle$（$\nu$ と μ_2 は変数，τ_2 と j_2 は固定）の全体を考える．これらは，表現 $\mathrm{G}^a\otimes\mathrm{G}^{(j_2)}$ の基底ベクトルのように線形に変換される．これらのベクトルは必ずしも線形独立でないから，これらの張る空間がこの表現に結びつくということは自動的に出てくるものではない．しかし，系IIIによれば，問題の表現は $\mathrm{G}^a\otimes\mathrm{G}^{(j_2)}$ そのものでなくても，ともかくその成分の一つである．このように，これらのベクトルは線形従属であるかも知れないけれども，定理Aのベクトル $|u1\rangle,\cdots,|u\nu\rangle,\cdots$ に適用した議論は一つ一つこれらのベクトルにも適用される．

まずつぎのベクトルを定義する：

$$|q\tau_2j_2\sigma k\chi\rangle=\sum_{\nu\mu_2}Q_\nu|\tau_2j_2\mu_2\rangle\langle aj_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle. \tag{16'}$$

行列 $\langle aj_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle$ のユニタリ関係により，

$$Q_\nu|\tau_2j_2\mu_2\rangle=\sum_{\sigma k\chi}|q\tau_2j_2\sigma k\chi\rangle\langle aj_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle^*. \tag{17'}$$

d_k 個のベクトル $|q\tau_2j_2\sigma k\chi\rangle$（$\chi$ は変数，その他は固定）はすべて0であるか，または表現 $\mathrm{G}^{(k)}$ の標準基底をつくる．あとの場合には定理Aが適用される．それゆえ，いずれの場合にも

$$\langle\tau j\mu|q\tau_2j_2\sigma k\chi\rangle=\delta_{jk}\delta_{\mu\chi}\langle\tau j\|Q\|\tau_2j_2\rangle_\sigma$$

となり，この式のなかの $\langle\tau j\|Q\|\tau_2j_2\rangle_\sigma$ は μ に無関係な定数である．したがって（17′）の両辺を $|\tau_1j_1\mu_1\rangle$ に射影すれば，

$$\langle\tau_1j_1\mu_1|Q_\nu|\tau_2j_2\mu_2\rangle=\sum_{k\chi}\delta_{j_1k}\delta_{\mu_1\chi}\left(\sum_\sigma\langle\tau_1j_1\|Q\|\tau_2j_2\rangle_\sigma\langle aj_2\nu\mu_2|\sigma k\chi\rangle^*\right)$$

となり，これから定理Bが得られる．（証明終）

選択規則

$|u\rangle, Q, |v\rangle$ がそれぞれ G^u, G^Q, G^v のように変換され，G^v の既約成分が $G^Q \otimes G^u$ の分解のなかに一つも現われないならば，必ず $\langle v|Q|u\rangle = 0$.

この規則の応用はきわめて広い．G^u と G^v が既約表現であるときは，定理Bの1°から簡単に出てくるのであるが，G^u, G^Q, G^v がいずれも既約でないときでもこの規則は適用される．これを証明するには，$Q|u\rangle$ が表現 $G^Q \otimes G^u$ またはその成分の一つにしたがって変換されること（系III）に注意し，ベクトル $Q|u\rangle$ に定理Aを当てはめればよい．

特殊な場合：回転群

定理AとBは特殊な場合として回転群に適用される．

二つの角運動量の合成の問題は定理Aの特殊な応用例である．第13章，§25で導入された $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個のベクトル $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ は，回転群[5]の既約表現 $D^{(j_1)}, D^{(j_2)}$ のテンソル積によってつくられる表現 $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ の基底ベクトルのように変換される．第13章の第V節で調べたところでは，この表現の既約成分への分解は

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} \simeq \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(J)} \tag{19}$$

であり，この分解をひき起こすユニタリ行列の要素がクレプシュ＝ゴーダン係数 $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$ である．この分解においては，どの既約表現もたかだか1回しか現われない（$J = j_1+j_2, j_1+j_2-1, \cdots, |j_1-j_2|$ に対して $n_J^{j_1 j_2} = 1$）から，この場合（12）の右辺の和はただ一つの項しか含まない．それゆえ，各部分空間 $\mathcal{E}(\tau J)$ における $|\alpha\, j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ の成分は（Mに無関係な）定数を除いて知られる．

ウィグナー＝エッカルトの定理（第13章，§32）もまた，回転に関して既約なテンソル演算子の成分 $T_q^{(k)}$，すなわち表現 $D^{(k)}$ の基底ベクトルのように変換される $(2k+1)$ 個の演算子に定理Bを適用した結果として得られる．

行列要素 $\langle \tau_1 j_1 m_1 | T_q^{(k)} | \tau_2 j_2 m_2\rangle$ は（14）によって与えられる．表現 $D^{(k)} \otimes D^{(j_2)}$ を既約成分に分解するとき，成分 $D^{(J)}$ はいずれも一回しか現われない（$J = k+j_2, \cdots, |k-j_2|$ に対して $n_J^{kj_2} = 1$）から，（14）の右辺の和はこの場合ただ一つの項しか含まない．

注意；第13章で採用した縮小行列の要素 $\langle \tau_1 j_1 \| T^{(k)} \| \tau_2 j_2\rangle$ の定義は，ここで採用した要素と因数 $\sqrt{2j_1+1}$ だけ違う．

不変オブザーバブル．$\mathcal{G}$ 縮退

Q が $\mathcal{G}$ に関して不変なオブザーバブルであるならば，

(5) ここで回転群 $\mathcal{R}_3$ について言うのは，実は言葉の誤用である．われわれが取り扱っているのは $\mathcal{R}_3$ の《被覆群》である群 $\mathcal{U}_2$ である．

$$\text{任意の } g \in \mathcal{G} \text{ に対して} \qquad [Q, G] = 0.$$

d_j 個のベクトル $Q|\tau j\mu\rangle$ (τ, j は固定；μ は変数) は表現 $\mathsf{G}^{(j)}$ の基底ベクトルのように変換される．定理Bによれば（定理Aあるいはシューアの補助定理によっても），この場合は

$$\langle \tau j\mu | Q | \tau' j' \mu' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'} Q_{\tau\tau'}^{(j)} \tag{20}$$

が成り立つ．それゆえ，群 $\mathcal{G}$ に適合する任意の標準表現において，Q は特に簡単な行列で表わされる．

この型の表現においては，Q の固有値問題がエルミート行列 $Q^{(j)}$ の対角化に帰着され，$Q^{(j)}$ の要素 $Q_{\tau\tau'}^{(j)}$ は添字 τ と τ' だけに依存する．こうして j の値の一つ一つに対応していくつかの Q の値，すなわち行列 $Q^{(j)}$ の固有値 $q_1^{(j)}, q_2^{(j)}, \cdots, q_i^{(j)}, \cdots$ が決まる．この行列の縮退しない固有値はすべて Q の固有値として d_j 重に縮退している．$Q^{(j)}$ の p 重に縮退した固有値はすべて Q の固有値として pd_j 重に縮退している．

特につぎの二つの性質に注意する．

1°　Q が $\mathcal{G}$ に関して不変であるならば，各固有値の部分空間は $\mathcal{G}$ に関して不変である．

2°　Q が $\mathcal{G}$ に関して不変なオブザーバブルで，有限次元の空間で定義されており，この空間のベクトルが表現 G にしたがって互いに変換され，G の既約成分への分解が

$$\mathsf{G} \simeq \sum_k n_k \mathsf{G}^{(k)}$$

であるとき，Q の固有値で異なるものの個数は多くとも $\sum_k n_k$ である．

既約テンソル演算子

演算子 Q が G^Q にしたがって変換されるとき，G^Q の既約成分の一つにしたがって変換される項の和の形に Q を書き表わすことがいつでも可能である．また，既約テンソル演算子には特に注意を払う値うちがある．

k 型の既約テンソル演算子 $\mathsf{T}^{(k)}$ の成分とは，既約表現 $\mathsf{G}^{(k)}$ にしたがって互いに線形に変換されるものであると定義する．それゆえ，この演算子は $\mathsf{G}^{(k)}$ の（d_k 次元の）表現空間を定める．特にそれは d_k 個の標準成分 $T_\chi^{(k)}$（k は固定，χ は変数）をもち，これらは上記の表現空間における標準基底をつくる．定義により（関係式 (10) を参照），

$$G T_\chi^{(k)} G^{-1} = \sum_\rho T_\rho^{(k)} G_{\rho\chi}^{(k)}. \tag{21}$$

既約表現 $\mathsf{G}^{(g)}$ と $\mathsf{G}^{(h)}$ のテンソル積を既約成分に分解した結果を

$$\mathsf{G}^{(g)} \otimes \mathsf{G}^{(h)} \simeq \sum_l n_l^{gh} \mathsf{G}^{(l)} \tag{22}$$

とし，この分解をひき起こすユニタリ行列の要素を $\langle gh\gamma\eta | \sigma l\lambda \rangle$ ($\sigma = 1, \cdots, n_l^{gh}$) とするとき，定理Bによれば，成分 $T_\chi^{(k)}$ の標準表現はつぎの注意すべき性質をもつ：

$$\langle \tau_1 j_1 \mu_1 | T_\chi^{(k)} | \tau_2 j_2 \mu_2 \rangle = \begin{cases} 0 & (n_{j_1}^{kj_2} = 0 \text{ のとき}) \\ \sum_{\sigma=1}^{n_{j_1}^{kj_2}} \langle \tau_1 j_1 \| T_\chi^{(k)} \| \tau_2 j_2 \rangle_\sigma \langle k j_2 \chi \mu_2 | \sigma j_1 \mu_1 \rangle^* & (n_{j_1}^{kj_2} \neq 0 \text{ のとき}). \end{cases} \tag{23}$$

結 語

以上を要約すれば，与えられた群 $\mathcal{G}$ の変換によって，量子力学のケットベクトルと演算子が変換されるとき，この変換の性質を十分に利用するには，つぎのことができればよい：

i) この群の既約表現を (同値性は除いて) 全部数え上げ，それらの一つ一つにつき，この表現の基底ベクトルを標準系に選び，それにしたがってこの表現の行列をつくる.

ii) これらの表現から二つずつとってテンソル積をつくり，これを既約成分に分解し，これらの積からこの分解をひき起こす行列を決定する (たとえば，(22) の係数 n_l^{gh} や《クレプシュ=ゴーダン係数》$\langle gh\gamma\eta | \sigma l \lambda \rangle$ を決定する).

III. 有 限 群

記 号

$\mathcal{F}$；考えている有限群.

N；群の位数.

f；群の要素.

L；共役類の個数 ($L \leqslant N$).

I；単位要素.

C；群の共役類.

f^a；共役類 C_a の要素.

l_a；共役類 C_a の要素の個数.

$k_a \equiv \sum_{i=1}^{l_a} f_i^a$；$C_a$ の要素の和.

F；$\mathcal{F}$ の表現.

χ；F の指標系.

F；F において f を表わす行列.

$K_a \equiv \sum_{i=1}^{l_a} F_i^a$.

F^r；正則表現.

$\chi(a) \equiv \mathrm{Tr}\, F^a = \dfrac{1}{l_a} \mathrm{Tr}\, K_a$.

$\mathsf{F}^{(j)}$；j 番目の既約表現 (同値のものを区別しない).

d_j；$\mathsf{F}^{(j)}$ の次数：$d_j = \chi^{(j)}(I)$.

$F^{(j)}$；$\mathsf{F}^{(j)}$ において f を表わすユニタリ行列，ただしこの表現の基底ベクトルは標準系に選んで固定する.

$F_{\alpha\beta}^{(j)} \equiv (f|j\alpha\beta)$ = 行列 $F^{(j)}$ の第 α 行第 β 列にある要素.

$\chi^j(a) \equiv (a|j)$；表現 $\mathsf{F}^{(j)}$ における共役類 C_a の指標.

§ 10. 一　般　論

並べかえの補助定理

群 $\mathcal{G}$ の要素全部をある順序に書き並べてできた列を $f_1, f_2, \cdots, f_N$ とするとき，この群の一つの要素 f をこれらの一つ一つに掛けて得られる列 $f_1f, f_2f, \cdots, f_Nf$ のなかには，群の各要素が一度だけ現われる．すなわち，新しい列はこの群の全要素を別の順序に書き並べたものである（この § 10 で述べる性質はすべてこの補助定理から簡単に導かれる）．

$\mathcal{G}$ の部分群

$\mathcal{G}$ の部分群 $\mathcal{H}$ の位数を N_h とすれば，N は N_h の倍数，すなわち

$$N = hN_h \qquad (h \text{ は整数} > 0)$$

である．h はこの部分群の指数と呼ばれる．

$\mathcal{H}$ が不変部分群ならば，その指数 h は商群 $\mathcal{G}/\mathcal{H}$ の位数である．

$\mathcal{G}$ の共役類

共役類の一つに属する要素の個数を l_a とすれば，N は l_a の倍数，すなわち

$$N = p_a l_a \qquad (p_a \text{ は整数} > 0)$$

である（共役類 C_a に属する一つの要素 f^a と交換する $\mathcal{G}$ の要素の全体は一つの部分群をつくり，その指数は l_a である）．

群環．共役類演算子（共役類和）k_a

$x^1, x^2, \cdots, x^N$ を任意の複素数とするとき，群の要素の線形結合 $\sum_{s=1}^{N} x^s f_s$ を考える．これらの全体は一つの（多元数）環すなわち群環をつくる．

同じ共役類に属する要素をすべて加えて得られる L 個の多元数

$$k_a \equiv \sum_{i=1}^{l_a} f_i^a \qquad (a = 1, 2, \cdots, L) \tag{24}$$

を共役類演算子という．これら L 個の演算子は，群環に属するすべての要素と交換し，この性質をもつすべての多元数はこれら L 個の演算子の線形結合である．

共 役 類 環

群が可換でない限り，群環は可換でない．しかし L 個の演算子 k_a の線形結合は一つの可換環をつくる．これを共役類環あるいは群環の中心という（群が可換ならば，共役類環は群環と同じものになる）．実際，

$$k_a k_b = k_b k_a = \sum_{c=1}^{L} g^c_{a\,b} k_c \tag{25}$$

が成り立つ．係数 $g^c_{a\,b}$ は 0 または正の整数である．

L 個の共役類演算子は線形独立ではあるが，関係式 (25) によって結ばれているから，それらのうちのいくつかの関数の形に書き表わされる．

各共役類演算子はたかだか L 次の代数方程式を満たす.

§ 11. 表　　現

正則表現 F^r

これは群の N 個の要素自体を基底ベクトルとしてとったときに得られる N 次の表現である. それゆえ, 表現空間のベクトルは群環の要素である.

F^r において f を表わす $N\times N$ 行列の各行各列は, 一つだけ 1 に等しい要素をもち, 他の要素はすべて 0 である.

群の表現の主な性質はほとんどすべて並べかえの補助定理, シューアの補助定理および正則表現の研究から導き出される.

一般の表現の性質

有限群の表現はいずれもこの群のあるユニタリ表現と同値である.

二つの表現が同じ指標系をもつとき, これらは同値である[6] (逆は明らかである).

線形演算子の列 $F_1, F_2, \cdots, F_N$ が有限群 $\mathcal{G}$ をつくり, ケット空間のなかの与えられたベクトルを $|u\rangle$ とするとき, 群の演算による $|u\rangle$ の変換は表現 F^u にしたがって行なわれる. この F^u は正則表現 F^r の成分である (F^u の位数が N ならば $\mathsf{F}^u \simeq \mathsf{F}^r$).

与えられた表現 F において, $k_1, k_2, \cdots, k_L$ は同時に対角化される行列 $K_1, K_2, \cdots, K_L$ によって表わされ, これらの行列は群の要素を表現する任意の行列と交換する. すなわち

$$[K_a, F] = 0 \tag{26}$$

が成り立つ.

既 約 表 現

a)　個数. 既約表現のうち同値でないものの個数は共役類の個数 L に等しい.

b)　次数. j 番目の既約表現 $\mathsf{F}^{(j)}$ $(j = 1, 2, \cdots, L)$ の次数を d_j とすれば,

$$N/d_j \text{ は整数であり,} \tag{27}$$

$$\sum_{j=1}^{L} d_j^2 = N. \tag{28}$$

c)　直交関係. 既約ユニタリ表現 $\mathsf{F}^{(j)}, \mathsf{F}^{(k)}$ が同値でないか, または等しいとき

$$\boxed{\frac{d_j}{N}\sum_{f=1}^{N} (f\,|\,j\alpha\beta)\,(f\,|\,k\gamma\delta)^* = \delta_{jk}\,\delta_{\alpha\gamma}\,\delta_{\beta\delta}.} \tag{29}$$

---

[6] これは, 既約成分への分解の一意性と既約表現の指標の直交性 (のちに述べる) に基づく. 無限群に対しても, 二つの表現が完全可約である場合には, これらの性質が成り立つ.

となる[7](*), (29) から指標の直交関係

$$\boxed{\sum_{a=1}^{L} \frac{l_a}{N}(a|j)(a|k)^* = \delta_{jk}} \tag{30}$$

が導き出される．

基底ベクトルを標準系に選んで各表現を曖昧さなく定めると，N^2 個の量

$$\sqrt{\frac{d_j}{N}}F^{(j)}_{\alpha\beta} \equiv \sqrt{\frac{d_j}{N}}(f|j\alpha\beta)$$

$$(f=1,2,\cdots,N;\ j=1,2,\cdots,L;\ \alpha,\beta=1,2,\cdots,d_j)$$

は一つの $N\times N$ 型ユニタリ行列の要素となる．同じように，L^2 個の量 $\sqrt{l_a/N}\chi^j(a)\equiv\sqrt{l_a/N}(a|j)$ は一つの $L\times L$ 型ユニタリ行列の要素となる．二つのユニタリ関係 (29) と (30) から，つぎの二つの式がそれぞれ導き出される：

$$\sum_{j=1}^{L}\sum_{\alpha,\beta=1}^{d_j}\frac{d_j}{N}(f|j\alpha\beta)(g|j\alpha\beta)^* = \delta_{fg} \tag{31}$$

$$\frac{l_a}{N}\sum_{j=1}^{L}(a|j)(b|j)^* = \delta_{ab}. \tag{32}$$

d) <u>特殊な場合</u>．$\mathrm{F}^{(k)}$ が恒等表現 $(k=1)$ であるとき，(29) と (30) により，

$$\sum_{f=1}^{N}(f|j\alpha\beta) = N\delta_{j1}, \qquad \sum_{a=1}^{L} l_a(a|j) = N\delta_{j1} \tag{33 a}$$

が得られる．g が単位要素であるとき $(g=I)$，(31) と (32) により，

$$\sum_{j\alpha\beta} d_j(f|j\alpha\beta) = N\delta_{fI}, \qquad \sum_{j} d_j(a|j) = N\delta_{aI} \tag{33 b}$$

が得られる．

e) <u>共役類演算子と指標との関係</u>．k_a を表わす行列 $K^{(j)}_a$ は<u>単位行列のスカラー倍</u>である（シューアの補助定理）．すなわち

$$K^{(j)}_a = k^{(j)}_a 1^{(j)}. \tag{34}$$

$$k^{(j)}_a = \frac{1}{d_j}\mathrm{Tr}\,K^{(j)}_a = \frac{l_a}{d_j}(a|j). \tag{35}$$

(25) と (35) から

$$l_a l_b (a|j)(b|j) = d_j \sum_{c=1}^{L} g^c_{ab}\, l_c (c|j) \tag{36}$$

---

(7) <u>証明</u>：任意の $d_j\times d_k$ 型行列を S とするとき，行列 $T\equiv\sum_{f=1}^{N}F^{(j)}SF^{(k)-1}$ は任意の f に対して $F^{(j)}T=TF^{(k)}$ という関係を満たす（並べかえの補助定理）．したがって（シューアの補助定理），$\mathrm{F}^{(j)}$ と $\mathrm{F}^{(k)}$ が同値でないかまたは等しいかによって，T は恒等的に 0 であるかまたは単位行列のスカラー倍である．S を適当に固定することにより，関係 (29) を得る．

(*) ［訳注］ (29) において $\sum_{f=1}^{N}$ は群 $\mathcal{G}$ のすべての要素 f についての和を意味する．

が導かれ，これから直交関係 (32) により，

$$g_{ab}^{c} = \frac{l_a l_b}{N} \sum_{j=1}^{L} \frac{1}{d_j} (a|j)(b|j)(c|j)^*. \tag{37}$$

§ 12. 一つの表現の既約成分を数えること

一般的な方法

表現 F の既約成分分解

$$\mathsf{F} \simeq \sum_{j=1}^{L} n_j \mathsf{F}^{(j)} \tag{38}$$

における係数 n_j を知るためには，その指標系 $\chi(a)$ と，群の L 個の既約表現の指標系を知れば十分である．等式（9）と関係式 (30) により，

$$n_j = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^{L} l_a (a|j)^* \chi(a). \tag{39}$$

注意；$p \equiv \dfrac{1}{N} \sum_{a=1}^{L} l_a |\chi(a)|^2 = \sum_{j=1}^{L} n_j^2$ が成り立つ．したがって $p = 1$ は F が既約であるための判定条件になる．

正則表現 $(\chi^r(a) = N\delta_{aI})$

$$\mathsf{F}^r \simeq \sum_{j=1}^{L} d_j \mathsf{F}^{(j)}. \tag{40}$$

群の各既約表現が正則表現のなかに現われる回数は，その既約表現の次数に等しい（関係 (28) はこれから出てくる）．

既約表現のテンソル積

$$\mathsf{F}^{(g)} \otimes \mathsf{F}^{(h)} \simeq \sum_{j=1}^{L} n_j^{gh} \mathsf{F}^{(j)}. \tag{41}$$

この場合，等式（9）は

$$(a|g)(a|h) = \sum_{j=1}^{L} n_j^{gh} (a|j) \tag{42}$$

と書かれ，(39) から

$$n_j^{gh} = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^{L} l_a (a|g)(a|h)(a|j)^*. \tag{43}$$

これら二つの関係式を (36) および (37) と比較せよ．

補助定理

$\mathsf{F}^{(j)}$ が $\mathsf{F}^{(g)} \otimes \mathsf{F}^{(h)}$ のなかに現われる回数は，$\mathsf{F}^{(g)}$ が $\mathsf{F}^{(j)} \otimes \mathsf{F}^{(h)*}$ のなかに現われる回数に等しい．

（注意；既約表現がすべて自己共役ならば，n_j^{gh} は三つの添字に関して対称である．）

1次の成分

二つの既約表現のテンソル積 $\mathsf{F}^{(g)}\otimes\mathsf{F}^{(h)}$ は，1次の成分をたかだか一つしか含まない．1次の表現 F_1 がこの積に現われるためには，

$$\mathsf{F}^{(g)}\simeq\mathsf{F}_1\otimes\mathsf{F}^{(h)*} \tag{44}$$

の成り立つことが必要十分である．

特に，この積の表現空間 $\mathcal{E}_g\otimes\mathcal{E}_h$ のなかには，群の変換によって不変なベクトルはたかだか一つしかない．このベクトルは

$$\mathsf{F}^{(g)}\simeq\mathsf{F}^{(h)*} \tag{45}$$

のときにだけ存在する．

§ 13.　既約不変部分空間を求めること

今後は各既約表現 $\mathsf{F}^{(j)}$ に対して，基底ベクトルが標準系に選ばれているとする．このとき，あるベクトルが $\mathsf{F}^{(j)}$ の標準基底に属する μ 番目のベクトルと同じように変換されるならば，このベクトルは $(j\mu)$ 型であるという．このように（ユニタリ）行列 $F^{(j)}$ が曖昧さを残さず定められたとき，§12の初めに述べた表現 F の空間 $\mathcal{E}$ において，群 $\mathcal{G}$ に適合する標準基底のベクトルをつくってみよう．われわれは，ケット空間のなかに与えられた一つのベクトル $|\ \rangle$ に群の演算子 $F_1, F_2, \cdots, F_N$ を施すことによって $\mathcal{E}$ がつくられる場合だけを考える $(n_j\leqslant d_j)$．群論を量子力学に応用するときは，実際上いつもこの場合に帰着させることができる．

正則表現の基底演算子 $B_{\mu\nu}^{(j)}$

N 個の演算子

$$B_{\mu\nu}^{(j)}\equiv\frac{d_j}{N}\sum_{f=1}^{N}(f\,|\,j\mu\nu)^*F \qquad (j=1,2,\cdots,L;\ \mu,\nu=1,2,\cdots,d_j) \tag{46}$$

を導入する．

直交関係 (31) により，群の N 個の演算子はこれらの演算子の線形結合になる．つまり

$$F=\sum_{j=1}^{L}\sum_{\mu,\nu=1}^{d_j}(f\,|\,j\mu\nu)\,B_{\mu\nu}^{(j)}. \tag{47}$$

F の一意性，並べかえの補助定理，関係 (29) から，つぎの基本性質が導き出される：

$$B_{\mu\nu}^{(j)\dagger}=B_{\nu\mu}^{(j)} \tag{48}$$

$$FB_{\mu\nu}^{(j)}=\sum_{\kappa}B_{\kappa\nu}^{(j)}(f\,|\,j\kappa\mu) \tag{49}$$

$$B_{\mu\nu}^{(j)}B_{\rho\sigma}^{(k)}=\delta_{jk}\delta_{\nu\rho}B_{\mu\sigma}^{(j)}. \tag{50}$$

(49) により，$B_{\mu\nu}^{(j)}$ が表わす群環の N 個の要素は，正則表現における標準基底をつくる．

$B^{(j)}_{\mu\nu}$ による標準基底の構成

演算子 $B^{(j)}_{\mu\nu}$ をつくることができれば——言いかえると，N^2 個の行列要素 $(f|j\mu\nu)$ がわかれば——$\mathcal{E}$ のなかに標準基底をつくるという問題は事実上解決する．

実際，

a) $B^{(j)}_{\mu\nu}|\ \rangle$ が 0 でなければ，$(j\mu)$ 型のベクトルである（式 (49)）．

b) N 個のベクトル $B^{(j)}_{\mu\nu}|\ \rangle$ は空間全体を張る（式 (47)）．

c) 同じ j の値に対する d_j^2 個のベクトル $B^{(j)}_{\mu\nu}|\ \rangle$ はつぎの性質をもつ：

i) 同じ ν の値に対する d_j 個のベクトル $(\mu=1,2,\cdots,d_j)$ は同じノルムをもち，ノルムを除けば表現 $\mathsf{F}^{(j)}$ の標準基底をつくる．

ii) 同じ μ の値に対する d_j 個のベクトル $(\nu=1,2,\cdots,d_j)$ は，$(j\mu)$ 型のベクトルから成る n_j 次元空間 $\mathcal{E}_{j\mu}$ を張り，これらは μ に無関係な係数をもつ (d_j-n_j) 個の線形関係式によって結びつけられる（特に $n_j=1$ のとき，これら d_j 個のベクトルは互いに他のスカラー倍であり，掛けられる因数は μ によらない）．

それゆえ，群に適合する標準基底を $\mathcal{E}$ のなかにつくるためには，j の値の一つ一つに対して μ の決まった値 $\bar{\mu}$ を選び，空間 $\mathcal{E}_{j\bar{\mu}}$ のなかに n_j 個の基底ベクトルの系を構成すればよい．そのためにはたとえばシュミットの直交化法が用いられる．すなわち

$$|\tau j\bar{\mu}\rangle=\sum_{\nu=1}^{d_j}c_\nu^{\tau j}B^{(j)}_{\bar{\mu}\nu}|\ \rangle,\qquad \langle\tau j\bar{\mu}|\tau' j\bar{\mu}\rangle=\delta_{\tau\tau'}\qquad(\tau=1,2,\cdots,n_j).$$

こうして得られたベクトル

$$|\tau j\mu\rangle\equiv\sum_{\nu=1}^{d_j}c_\nu^{\tau j}B^{(j)}_{\mu\nu}|\ \rangle$$

$$(j=1,2,\cdots,L;\ \mu=1,2,\cdots,d_j;\ \tau=1,2,\cdots,n_j)$$

は求める標準基底をつくり，d_j 個のベクトル $|\tau j\mu\rangle$（τ と j は固定，$\mu=1\cdots,d_j$）は表現 $\mathsf{F}^{(j)}$ の標準基底をつくる．

$B^{(j)}_{\mu\nu}$ の他の性質．空間 $\mathcal{E}_{j\mu}$ への射影子と相互間の移動

$$\Pi^{(j)}_\mu\equiv B^{(j)}_{\mu\mu}\equiv\frac{d_j}{N}\sum_{f=1}^{N}(f|j\mu\mu)^*F \tag{51}$$

と置く．

演算子 $\Pi^{(j)}_\mu$ $(j=1,2,\cdots,L;\ \mu=1,2,\cdots,d_j)$ は直交射影子の列をつくり，その和は 1 に等しい[8]．すなわち

$$\Pi^{(j)\dagger}_\mu=\Pi^{(j)}_\mu \tag{52}$$

---

(8) このことはどのような F についても成り立つ．この表現が F^{Γ} の成分でなくてもよい．

$$\Pi_{\mu}^{(j)}\Pi_{\rho}^{(k)}=\delta_{jk}\delta_{\mu\rho}\Pi_{\mu}^{(j)} \tag{53}$$

$$\sum_{j=1}^{L}\sum_{\mu=1}^{d_j}\Pi_{\mu}^{(j)}=1. \tag{54}$$

$\Pi_{\mu}^{(j)}$ は $(j\mu)$ 型のベクトルから成る空間 $\mathcal{E}_{j\mu}$ への射影子である（式 (49)）．1の分解 (54) により，$\mathcal{E}$ の任意のベクトルは，それぞれ一つの特殊な空間 $\mathcal{E}_{j\mu}$ に属するベクトルの和，すなわち

$$|u\rangle\equiv\sum_{j\mu}\Pi_{\mu}^{(j)}|u\rangle$$

という形に表わされる．

$\mu\neq\nu$ のとき，演算子 $B_{\mu\nu}^{(j)}$ は部分空間 $\mathcal{E}_{j\nu}$ から部分空間 $\mathcal{E}_{j\mu}$ への移動演算子である．実際，(50) と (48) により，

$$\Pi_{\gamma}^{(g)}B_{\mu\nu}^{(j)}\Pi_{\eta}^{(h)}=\delta_{gj}\delta_{jh}\delta_{\gamma\mu}\delta_{\nu\eta}B_{\mu\nu}^{(j)} \tag{55}$$

$$B_{\mu\nu}^{(j)\dagger}B_{\mu\nu}^{(j)}=\Pi_{\nu}^{(j)}. \tag{56}$$

それゆえ，$B_{\mu\nu}^{(j)}$ の演算によって，$\mathcal{E}_{j\nu}$ に直交するベクトルはすべて0になり，$\mathcal{E}_{j\nu}$ に属するベクトルはすべて $\mathcal{E}_{j\mu}$ のベクトルに変換される．このようにしてこれら二つの空間のあいだにつくられた対応は一対一であり，内積を保存する．

$|\sigma j\nu\rangle$ が $(j\nu)$ 型のベクトルであるとき，d_j 個のベクトル $B_{\mu\nu}^{(j)}|\sigma j\nu\rangle$ $(\mu=1,2,\cdots,d_j)$ は表現 $\mathsf{F}^{(j)}$ の標準基底をつくる．

共役類演算子 K_a の利用．射影子 $P^{(j)}$

$\mathcal{E}$ の既約不変部分空間を求めるだけが目的ならば，標準行列を構成する N^2 個の要素 $F_{\mu\nu}^{(j)}\equiv(f|j\mu\nu)$ を知ることは必ずしも必要でない．

共役類演算子

$$K_a=\sum_{i=1}^{l_a}F_i^a \qquad (a=1,2,\cdots,L)$$

には共通の基底系が（少なくとも一つ）存在する．この系に属する各ベクトルには，上記の演算子の固有値の列 $k\equiv(k_1,k_2,\cdots,k_L)$ が一つ対応する．固有値の列 $k^{(1)},k^{(2)},\cdots,k^{(L)}$ は全部で L 個存在するが，これらは (35) によって定められ，その一つ一つが，群の一つの既約表現に対応する．したがって，$K_1,K_2,\cdots,K_L$ を同時に対角化すれば，固有値の列 $k^{(j)}$ はそれぞれ n_jd_j 重に縮退しており，その部分空間 $\mathcal{E}_j$ は F の成分 $n_j\mathsf{F}^{(j)}$ を定める．n_j がすべて1に等しいときには，このことから $\mathcal{E}$ の既約不変部分空間への分解が自動的に実現される．そうでないときには，$n_j>1$ となる部分空間 $\mathcal{E}_j$ の一つ一つにおいて，この分解を行なうことが残される．

L 個の演算子 K は，そのうちの一部分の演算子の関数として表わされることを思い出そう．このことから，K を全部対角化するためには，その一部分を対角化しさえすればよ

いことがわかる．

演算子 K を対角化する問題は，群の既約表現全部について指標系がわかれば，実際上解くことができる（物理学で用いられる群の大部分については，指標の表がすでにできている．脚注(1)を参照）．事実，空間 $\mathcal{E}_j$ への射影子 $P^{(j)}$ はつぎのようになる．

$$P^{(j)} \equiv \sum_{\mu=1}^{d_j} \Pi_\mu^{(j)} = \frac{d_j}{N} \sum_{f=1}^{N} \chi^{(j)*}(f) F = \frac{d_j}{N} \sum_{a=1}^{L} (a|j)^* K_a. \tag{57}$$

IV. 置　　換 (9)

（群 $\mathcal{S}_n$）

§ 14. 一般論．巡回置換．共役類

定　　義

n 個の箱に n 個のもの (objet) が割り当てられているとする（例：n 個の量子的状態にある n 粒子）．これら n 個のものに一つの**置換**を施すというのは，n 個の箱に対する n 個のものの割り当て方を変えることである．n 個のものにはそれぞれ 1 から n まで動く整数の添字をつけることができる．一つの置換は

$$p = \begin{pmatrix} \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n \\ \beta_1 \beta_2 \cdots \beta_n \end{pmatrix}$$

という記号によって指定される．ここで $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$ は 1 から n までの整数のリストであり，その順序は任意に選んで書き並べる．また，$\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_n$ も同じ数のリストであるが，はじめの割り当てにおいてもの α_i が占めていた箱を，新しい割り当てにおいてはもの β_i が占めるような順序で書き並べる．たとえば 5 個のものの置換

$$p_a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

によって，もの 5 は 1 の場所を，3 は 2 の場所を，…，4 は 5 の場所をとる．この記号において縦の列の順序を変えても，記号の意味が変わらないことは明らかである．

二つの置換 p_a, p_b をつづけて施した結果はただ一つの置換 $p_c \equiv p_b p_a$ と同値になる．これを書き易くするには，記号 p_b の上の行を記号 p_a の下の行と同じにすればよい．たとえば，p_a が上に定めた置換であり，

---

(9) ヤングの図表の理論とその置換群への応用については，D. E. RUTHERFORD の著書，*Substitutional Analysis*, University Press, Edinburgh, 1948のなかに簡潔で完全な解説がある．群 $\mathcal{S}_n$ の理論の本質的な事項は，B. L. V. D. WAERDEN, *Modern Algebra*, Ungar, Ed., New York, 1950, 第II巻, p. 190−193 に述べられている．

$$p_b = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 3 & 5 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \\ 2 & 5 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}$$

とすれば,

$$p_c \equiv p_b p_a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 5 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}.$$

特に, p の逆置換は, p を表わす記号の上下の行を交換して得られる記号で表わされる. すなわち

$$p^{-1} = \begin{pmatrix} \beta_1 \beta_2 \cdots \beta_n \\ \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n \end{pmatrix}.$$

n 個のものの置換の全体は位数 $n!$ の群をつくる.

巡回置換. 巡回記号

置換 $\begin{pmatrix} \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{k-1} \alpha_k \alpha_{k+1} & \cdots \alpha_n \\ \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_k \quad \alpha_1 \alpha_{k+1} & \cdots \alpha_n \end{pmatrix}$ によって, α_2 は α_1 の場所を, α_3 は α_2 の場所を, α_k は α_{k-1} の場所を, α_1 は α_k の場所をとり, 残りの $(n-k)$ 個のもの $\alpha_{k+1}, \cdots, \alpha_n$ はそれぞれもとの場所にとどまる. この置換を k 個のもの $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k$ の巡回置換と定義する. k をこの巡回置換の長さという. この型の置換は記号

$$p = (\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_k) \tag{58}$$

によって表わされる. このリストの最初にある α_1 は最後にある α_k の場所をとり, その他のものはそれぞれすぐ左に書かれたものの場所をとるという規約である. この記法において, k 個の数字の順序は, 円置換(*)を除いて定まる.

共通な要素をまったくもたない二つの巡回置換は交換する.

n 個のものの置換は, 互いに交換する巡回置換の積であり (これらの巡回置換のどの二つをとっても共通な要素がなく), この分解は一意的である.

たとえば, さきに定めた置換 p_a は (154) と (23) の積であり, 巡回表示

$$p_a = (154)(23) = (23)(154)$$

によって表わされる. また,

$$p_b = (14)(235), \qquad p_c = (125)(3)(4).$$

長さ1の巡回置換は恒等置換と同じで, 場合によっては省略される. たとえば簡単に $p_c = (125)$ と書く. この省略を行なわないとき, 与えられた置換に含まれる巡回置換の長さの和は n に等しい.

一つの置換はつぎの i), ii) により完全に決められる.

i) 巡回構造, すなわちその置換に含まれる巡回置換の個数 h $(\leqslant n)$ とその一つ一

(*) [訳注] たとえば $(\alpha_1\alpha_2 \cdots \alpha_k)$ を $(\alpha_{r+1} \cdots \alpha_k \alpha_1 \cdots \alpha_r)$ に変えるような操作をいう.

つの長さ $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_h$ $(\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_h=n)$.

ii) 各巡回置換に現われる数字と，それが並ぶ順序，ただし円置換だけの違いは無視する.

各巡回置換のなかで数字の並ぶ順序を逆にすると，逆置換がつくられる．たとえば

$$p_a^{-1}=(451)(32).$$

共　役　類

<u>同じ巡回構造をもつ二つの置換は同じ共役類に属し，逆も成り立つ</u>.

p に共役な要素を $p'=xpx^{-1}$ とするとき，p の巡回表示から p' の巡回表示を導くには，p の表示に現われる n 個の数字に，置換 x を施せばよい.

例：

$$p_a=\begin{pmatrix}1&5&4&2&3\\5&4&1&3&2\end{pmatrix}=(154)(23)$$

$$x=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5\\2&4&1&3&5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5&4&1&3&2\\5&3&2&1&4\end{pmatrix},\qquad x^{-1}=\begin{pmatrix}2&5&3&4&1\\1&5&4&2&3\end{pmatrix}$$

$$p'\equiv xp_ax^{-1}=\begin{pmatrix}2&5&3&4&1\\5&3&2&1&4\end{pmatrix}=(253)(41).$$

互　　換

二つのものの置き換え（長さ２の巡回置換）を互換という．互換の全体は $\mathcal{S}_n$ の共役類の一つをつくる.

与えられた長さ k の巡回置換はつねに $(k-1)$ 個の互換の積に等しい．すなわち

$$(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k)=(\alpha_1\alpha_2)(\alpha_2\alpha_3)\cdots(\alpha_{k-1}\alpha_k).$$

もっと一般に，任意の置換 p は互換の積の形に書かれる．この分解は一意的でないが，そこに現われる互換の個数ははっきり決まった偶奇性をもつ．この偶奇性を今後は $(-)^p$ で表わす．$(-)^p=+1$ であるか，または $(-)^p=-1$ であるかによって，p は<u>偶</u>または<u>奇</u>であるという.

$\mathcal{S}_n$ の部分群．群 $\mathcal{A}_n$

$\mathcal{S}_n$ はただ一つの<u>不変部分群</u>をもつ．それは偶置換の全体から成る群 $\mathcal{A}_n$ である（これは指数２の部分群で，これによる商群は可換であり，これに関する他の剰余類は奇置換の全体である）(*).

このほか $\mathcal{S}_n$ の部分群のうちには，n より少数のもの，m 個のものの置換から成る群 $\mathcal{S}_m$ $(m<n)$，群 $\mathcal{A}_m$ $(m<n)$ などがある．$\mathcal{S}_m$ の指数は $(n!/m!)$，$\mathcal{A}_m$ の指数は $2(n!/m!)$ である.

(*)［訳注］$\mathcal{S}_n, \mathcal{A}_n$ はそれぞれ，n 次対称群，n 次交代群と呼ばれる.

$\mathcal{S}_n$ の対称化演算子と反対称化演算子

$\mathcal{S}_n$ に属する変換の線形結合のうち，対称化演算子 s と反対称化演算子(*) a の二つは特にたいせつな役割を演じる．これらの定義は

$$s \equiv \frac{1}{n!}\sum_p p, \qquad a \equiv \frac{1}{n!}\sum_p (-)^p p \tag{59}$$

である (右辺は群 $\mathcal{S}_n$ に属する $n!$ 個の要素について和をとる)．s と a は共役類演算子の特殊な線形結合である．これらは群のすべての変換と交換し，またつぎの注目すべき性質をもつ．

$$qs = sq = s, \qquad qa = aq = (-)^q a \qquad (q\text{は任意にとった特殊な置換}) \tag{60}$$

$$s^2 = s, \qquad a^2 = a. \tag{61}$$

§ 15.　分　　割

定　　義

整数 n の分割 $\lambda \equiv [\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_h]$ というのは，$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_h$ の順に並べられた正の整数の列で，その和が n に等しくなるものである．すなわち

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_h = n.$$

一つの置換の巡回構造は，n のはっきり決まった分割によって定められるから，n の各分割は $\mathcal{S}_n$ の共役類を一つずつ定める．

大 小 関 係

n の二つの分割を $\lambda \equiv [\lambda_1 \cdots \lambda_h]$，$\mu \equiv [\mu_1 \cdots \mu_k]$ とする．ここで

$h = k$ で $\lambda_1 = \mu_1$，$\lambda_2 = \mu_2, \cdots, \lambda_h = \mu_k$ のとき　　$\lambda = \mu$

列 $\lambda_1 - \mu_1$，$\lambda_2 - \mu_2 \cdots$ の 0 でない最初の項が正ならば　　$\lambda > \mu$

列 $\lambda_1 - \mu_1$，$\lambda_2 - \mu_2 \cdots$ の 0 でない最初の項が負ならば　　$\lambda < \mu$

と定義する．

例：$n = 5$ のときは，[5] > [4 1] > [3 2] > [3 1^2] など ([3 1^2] は [3 1 1] の略記法であると規約する)．

ヤングの図形 Y_λ

与えられた分割 $[\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_h]$ はヤングの図形 (diagramme) Y_λ によって表わされる．これは n 個の正方形を h 個の行に配列し，それらを上から下へ並べ，第1行には λ_1 個の正方形を，第2行には λ_2 個の正方形を，…，第 h 行には λ_h 個の正方形を割り当てたものである (D・1 図を参照)．

(*) [訳注]　交代化演算子 (作用素) と言われるものである．

ヤングの図表 Θ_λ^p

ヤングの図形 Y_λ の n 個の箱には，1 から n までの整数を割り当てることができ，その方法は全部で $n!$ 通りある．一つの割り当てによって，**ヤングの図表** (tableau) が一つ得られる．

整数 $1, 2, \cdots, n$ を普通の順序に第 1 行から第 h 行まで並べて得られる図表を Θ_λ で表わし，**標準図表** (tableau normal) と呼ぶ．すなわち第 1 行に並べるのは $1, 2, \cdots, \lambda_1$，第 2 行には $\lambda_1+1, \lambda_1+2, \cdots, \lambda_1+\lambda_2$，など．図表 Θ_λ のなかの n 個の数字に置換 p を施すことによって，新しい図表 $\Theta_\lambda^p \equiv p\Theta_\lambda$ が得られる．$q\Theta_\lambda^p \equiv \Theta_\lambda^{qp}$ であり，ヤングの図形一つにつき $n!$ 個の異なる図表が存在することに注意する（D・2 図を参照）．

同伴分割

二つの分割に対するヤングの図形が，行と列をとりかえること（主対角線に関する対称変換）によって，一方から他方へ移るとき，これらの分割は互いに同伴であるという．今後は，この型の対応を記号 ～ によって表わす．たとえば $\tilde{\lambda} \equiv [\tilde{\lambda}_1 \cdots \tilde{\lambda}_k]$ は $\lambda \equiv [\lambda_1 \cdots \lambda_h]$ の同伴分割を表わす．$k = \lambda_1$, $h = \tilde{\lambda}_1$ であり，$\tilde{\lambda}_s$ は分割 λ の要素 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_h$ のうち，s 以上のものの個数であり，逆も成り立つことに注意する．

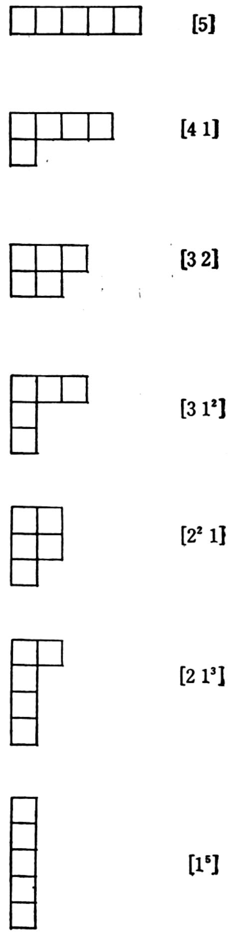
同じように，ヤングの図形 Y_λ に対する同伴図形 $\tilde{Y}_\lambda \equiv Y_{\tilde{\lambda}}$ と，Θ_λ^p に対する同伴図表 $\tilde{\Theta}_\lambda^p$ を定めることができる．

$$\tilde{\Theta}_\lambda^p = p\tilde{\Theta}_\lambda$$

であるが，一般に

$$\tilde{\Theta}_\lambda \neq \Theta_{\tilde{\lambda}}$$

であることに注意する（D・2 図を参照）．



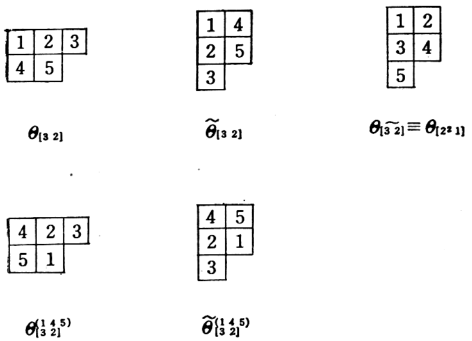
D・1 図　5 の分割とヤングの図形

§ 16.　ヤングの《対称化演算子》．既約表現をつくること

Θ_λ の行と列の《対称化演算子》$s_\lambda, a_\lambda, \bar{s}_\lambda, \bar{a}_\lambda$

Θ_λ の行の対称化演算子 s_λ と，Θ_λ の行の反対称化演算子 a_λ とはつぎのように定義される：

$$s_\lambda \equiv \frac{1}{\lambda_1!\,\lambda_2!\cdots\lambda_h!}\sum_h h_\lambda \tag{62}$$



D・2図　整数5の分割 $\lambda \equiv [3\ 2]$ と $\tilde{\lambda} \equiv [2^2\ 1]$ に対するいくつかの図表

$$a_\lambda \equiv \frac{1}{\lambda_1!\,\lambda_2!\cdots\lambda_h!} \times \sum_h (-)^h h_\lambda. \tag{63}$$

ここで和をとる範囲は，Θ_λ の各行を不変にする $\lambda_1!\,\lambda_2!\cdots\lambda_h!$ 個の置換 h_λ，すなわち，巡回置換に分解したとき各巡回置換に現われる要素が Θ_λ の同じ行に属するような置換の全部にわたる．h_λ の全体は $\mathcal{S}_n$ の部分群 $\mathcal{S}_{[\lambda]}$ をつくる．

Θ_λ の第 i 行にある λ_i 個のものの置換全体から成る群を $\mathcal{S}_{\lambda_i}$ とすれば，$\mathcal{S}_{[\lambda]}$ は $\mathcal{S}_n$ の部分群 $\mathcal{S}_{\lambda_1}, \mathcal{S}_{\lambda_2}, \cdots, \mathcal{S}_{\lambda_h}$ の積である．s_λ と a_λ とはそれぞれこれら h 個の部分群の対称化演算子および反対称化演算子の積である．

同じように，Θ_λ の列（すなわち $\widetilde{\Theta}_\lambda$ の行）の対称化演算子 $\tilde{s}_\lambda$ と反対称化演算子 $\tilde{a}_\lambda$ が定義される．すなわち演算子

$$\tilde{s}_\lambda \equiv \frac{1}{\tilde{\lambda}_1!\cdots\tilde{\lambda}_k!}\sum_v v_\lambda \tag{64}$$

$$\tilde{a}_\lambda \equiv \frac{1}{\tilde{\lambda}_1!\cdots\tilde{\lambda}_k!}\sum_v (-)^v v_\lambda \tag{65}$$

である．和をとる範囲は，Θ_λ の各列を不変にする $\tilde{\lambda}_1!\cdots\tilde{\lambda}_k!$ 個の置換 v_λ の全体にわたる．

主な性質

a)　これは対称化演算子または反対称化演算子の積であり，したがって

$$s_\lambda^2 = s_\lambda, \qquad a_\lambda^2 = a_\lambda, \qquad \tilde{s}_\lambda^2 = \cdots \tag{66}$$

$$h_\lambda s_\lambda = s_\lambda h_\lambda = s_\lambda, \qquad h_\lambda a_\lambda = a_\lambda h_\lambda = (-)^h a_\lambda, \qquad v_\lambda \tilde{s}_\lambda = \cdots \tag{67}$$

b)　$\mathcal{S}_n$ に属する変換の任意の線形結合（群 $\mathcal{S}_n$ の群環の要素）を $\varpi \equiv \sum_p x_p p$ とするとき，

$$\lambda > \mu \qquad \text{または} \qquad \tilde{\lambda} < \tilde{\mu} \tag{68}$$

ならば[10]，

$$\tilde{a}_\mu \varpi s_\lambda = s_\lambda \varpi \tilde{a}_\mu = 0, \qquad \tilde{s}_\mu \varpi a_\lambda = a_\lambda \varpi \tilde{s}_\mu = 0. \tag{69}$$

---

(10) 条件 (68) の一方から他方は必ずしも出てこない．例：$\lambda = [4\ 1^2]$，$\mu = [3\ 3]$ のとき，$\lambda > \mu$ である．しかし $\tilde{\lambda} = [3\ 1^3]$，$\tilde{\mu} = [2^3]$，したがって $\tilde{\lambda} > \tilde{\mu}$.

特に，条件 (68) のどちらかが成り立つならば，

$$\tilde{a}_\mu s_\lambda = s_\lambda \tilde{a}_\mu = \tilde{s}_\mu a_\lambda = a_\lambda \tilde{s}_\mu = 0. \tag{70}$$

《既約対称化演算子》 i_λ と j_λ

$$\left.\begin{aligned} i_\lambda &\equiv s_\lambda \tilde{a}_\lambda \equiv (\lambda_1! \cdots \lambda_h! \tilde{\lambda}_1! \cdots \tilde{\lambda}_k!)^{-1} \sum_{hv} (-)^v h_\lambda v_\lambda \qquad (i_\lambda \neq 0) \\ j_\lambda &\equiv \tilde{a}_\lambda s_\lambda \equiv (\lambda_1! \cdots \lambda_h! \tilde{\lambda}_1! \cdots \tilde{\lambda}_k!)^{-1} \sum_{hv} (-)^v v_\lambda h_\lambda \qquad (j_\lambda \neq 0) \end{aligned}\right\} \tag{71}$$

便宜上 i_λ と j_λ をそれぞれ Θ_λ の《既約対称化演算子》および《既約反対称化演算子》と呼ぶ．同じように，$\tilde{\Theta}_\lambda$ の既約対称化演算子と既約反対称化演算子

$$\tilde{i}_\lambda \equiv \tilde{s}_\lambda a_\lambda, \qquad \tilde{j}_\lambda \equiv a_\lambda \tilde{s}_\lambda$$

を定義する．ϖ を上記のようにとれば，

$$s_\lambda \varpi \tilde{a}_\lambda = 定数 \times i_\lambda, \qquad \tilde{a}_\lambda \varpi s_\lambda = 定数 \times j_\lambda \tag{72}$$

であることが示される．(69) と (72) から

$$i_\lambda i_\mu = i_\mu i_\lambda = 定数 \times \delta_{\lambda\mu} i_\lambda, \qquad j_\lambda j_\mu = j_\mu j_\lambda = 定数 \times \delta_{\lambda\mu} j_\lambda \tag{73}$$

であることが容易に導かれる．

基本定理

i） 群 $\mathcal{S}_n$ の正則表現の空間においては，ベクトル ϖi_λ（ϖ は $\mathcal{S}_n$ の群環の任意の要素）の全体は一つの既約不変部分空間 $\mathcal{E}_\lambda$ を張り，したがって $\mathcal{S}_n$ の既約表現の一つ $\mathrm{P}^{(\lambda)}$ に結びつけられる．

ii） ベクトル ϖj_λ の全体は同じ不変部分空間 $\mathcal{E}_\lambda$ を張る．

iii） $\lambda \neq \mu$ ならば，既約表現 $\mathrm{P}^{(\lambda)}$ と $\mathrm{P}^{(\mu)}$ は同値でない．

$\mathcal{S}_n$ の既約表現の個数はその共役類の個数，したがって n の分割の個数に等しいから，この定理によって既約表現を全部つくることができる．したがって，$\mathcal{S}_n$ の各既約表現は，はっきり決まったヤングの図形によって特徴づけられる．

同伴図形と同伴表現の《対称化演算子》

群環の各要素 $\varpi = \sum_p x_p p$ に要素 $\varpi' = \sum_p (-)^p x_p p$ を対応させる．この対応は線形，一対一で，つぎの性質をもつ：

a） $\eta = p\varpi$ ならば　$\eta' = (-)^p p \varpi'$.

b） $\zeta = \varpi\eta$ ならば　$\zeta' = \varpi'\eta'$　（積の保存）．

同伴図表 $\Theta_\lambda, \tilde{\Theta}_\lambda$ の《対称化演算子》は，この方法によって互いに対応させられることに注意する．実際，

$$a_\lambda = s'_\lambda, \qquad \tilde{a}_\lambda = \tilde{s}'_\lambda$$

したがって

$$\tilde{i}_\lambda \equiv \tilde{s}_\lambda a_\lambda = j'_\lambda \qquad \tilde{j}_\lambda \equiv a_\lambda \tilde{s}_\lambda = i'_\lambda. \tag{74}$$

基本定理にしたがって表現 $\mathrm{P}^{(\lambda)}$ を定める基底ベクトルの列を $\varpi_1 i_\lambda, \varpi_2 i_\lambda, \cdots$ とすれば，(74) によってこれに対応するベクトルは $\varpi'_1 \tilde{j}_\lambda, \varpi'_2 \tilde{j}_\lambda, \cdots$ である．これらは表現 $\mathrm{P}^{(\tilde{\lambda})}$ を定める．このように基底系を選べば，それぞれの表現において与えられた置換 p を表わす行列 $P^{(\lambda)}$ と $P^{(\tilde{\lambda})}$ は，つぎの関係によって結びつけられる：

$$P^{(\tilde{\lambda})} = (-)^p P^{(\lambda)}. \tag{75}$$

Θ_λ^p の《対称化演算子》

図表 Θ_λ から出発して行なったのと同じことを，図表 Θ_λ^p から出発して行ない，置換 h_λ^p, v_λ^p および対称化演算子 $s_\lambda^p, \cdots, i_\lambda^p, \cdots$ を定義することができる．

$$h_\lambda^p = p h_\lambda p^{-1}, \qquad v_\lambda^p = p v_\lambda p^{-1}$$

に注意して，

$$s_\lambda^p = p s_\lambda p^{-1}, \qquad a_\lambda^p = \cdots, \quad \text{など}. \tag{76}$$

Θ_λ^p の《対称化演算子》は Θ_λ の《対称化演算子》と類似の性質をもつ．関係 (76) により，前者は後者から容易に導き出される．

§ 17. $\mathcal{S}_n$ の既約表現の主な性質

$\mathcal{S}_n$ の既約表現の性質は前の § 16 で与えられた《対称化演算子》の性質からほとんどすべて導き出される．

$\mathcal{S}_n$ の各既約表現 $\mathrm{P}^{(\lambda)}$ は，一つのヤングの図形によって特徴づけられ，既約対称化演算子 i_λ（または j_λ）によってつくられる．

それらはすべて自己共役である．すなわち

$$\mathrm{P}^{(\lambda)*} \simeq \mathrm{P}^{(\lambda)}. \tag{77}$$

1次の表現

1次の表現は二つしかなく，それらは

i）恒等（すなわち対称）表現 S.

ii）各置換 p を $(-)^p$ で表わす反対称表現 A.

これらはそれぞれ s および a によってつくられる（式 (59)）．

S のヤングの図形はただ1行から成り，分割 $[n]$ を表わす．A の図形はただ1列から成り，分割 $[1^n]$ を表わす．

同伴既約表現

二つの既約表現 $\mathrm{P}^{(\lambda)}, \mathrm{P}^{(\tilde{\lambda})}$ が互いに同伴であるといわれるのは，それらのヤングの図形が互いに同伴であるときである．(75) の結果として，

$$\mathrm{P}^{(\tilde{\lambda})} \simeq \mathrm{A} \otimes \mathrm{P}^{(\lambda)} \tag{78}$$

が成り立つ．

テンソル積 $\mathrm{P}^{(\lambda)}\otimes\mathrm{P}^{(\mu)}$ の１次の成分

$\mathrm{P}^{(\lambda)}\otimes\mathrm{P}^{(\mu)}$ が１次の成分を一つ（実はただ一つ）もつのは，つぎの二つの条件のうちの一つが満たされるときだけである：

i） $\lambda=\mu$，この場合１次の成分は S.

ii） $\lambda=\tilde{\mu}$，この場合１次の成分は A.

$\mathrm{P}^{(\lambda)}$ に含まれる $\mathcal{S}_{n-1}$ の既約表現

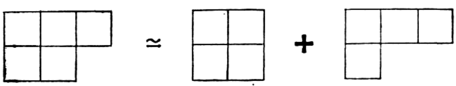
$\mathcal{S}_n$ の既約表現はいずれもその部分群 $\mathcal{S}_{n-1}$ の（必ずしも既約でない）表現になっている.

群 $\mathcal{S}_t$ の既約表現で，整数 t の分割 λ に対応するものを記号 $\mathrm{P}_t^{(\lambda)}$ で表わす．$\mathrm{P}_n^{(\lambda)}$ を群 $\mathcal{S}_{n-1}$ に関して既約成分に分解すれば，

$$\mathrm{P}_n^{(\lambda)}\simeq\sum_{\mu}\mathrm{P}_{n-1}^{(\mu)} \tag{79}$$

となることが示される．ここで，整数 n の分割 λ を表わすヤングの図形から一つの正方形を除けば，整数（$n-1$）の分割 μ を表わす図形が得られる．このような μ の全体について和をとるのである.

例：



法則（79）により，$\mathcal{S}_{n-1}$ の指標と $\mathcal{S}_n$ のある指標とのあいだの漸化式をつくることができる．特にこれを利用して，$\mathcal{S}_{n-1}$ の既約表現の次数から $\mathcal{S}_n$ の表現の次数を導き出すことができる.

与えられた表現 P の既約不変部分空間をつくること

表現 P において，さきに導入されたいろいろな《対称化演算子》は線形エルミート演算子（定数を除けば射影子である）によって表わされる．これらを対応する大文字によって書き表わす.

P の既約成分のつくり方は§16の基本定理から出てくる．表現 P の空間 $\mathcal{E}$ に任意のベクトル $|u\rangle$ をとるとき，$I_\lambda|u\rangle$ が０でなければ，$I_\lambda|u\rangle$ は $\mathrm{P}^{(\lambda)}$ のように変換され，その表現空間は０でないベクトル $J_\lambda|u\rangle$ を含む．$\mathcal{E}$ の基底ベクトルに I_λ を適用してつくられるベクトル $I_\lambda|\ \rangle$ の全体は一つの部分空間 $\mathcal{I}_\lambda$ を張り，この次元は P に含まれる成分 $\mathrm{P}^{(\lambda)}$ の個数 n_λ に等しい．$\mathcal{I}_\lambda$ の直交規格化された基底ベクトルの一つを $|\sigma\rangle$ とすれば，ベクトル $|\sigma\rangle$ にこの群の変換を施して得られる空間 $\mathcal{E}_{\sigma\lambda}$ は $\mathrm{P}^{(\lambda)}$ の表現空間の一つである．$\mathcal{I}_\lambda$ の n_λ 個の基底ベクトルにこの操作を施すことにより，直交する表現空間が n_λ 個

得られる．

空間 $\mathcal{E}$ の演算子 Q が $\mathcal{S}_n$ に関して不変であるとき，Q は各部分空間 $\mathcal{I}_\lambda$ のベクトルを同じ $\mathcal{I}_\lambda$ のベクトルに線形に変換する．空間 $\mathcal{E}$ において Q を対角化する問題は，部分空間 $\mathcal{I}_\lambda$ の一つ一つにおいて対角化してしまえば完全に解決される．

$P^{(2)}$ のベクトルの対称性

ケットベクトルは一般にはっきり決まった対称性あるいは反対称性をもたない．ベクトル $|\ \rangle$ がはっきり決まった対称性 S_λ をもつというのは，それが射影子 S_λ の部分空間に属するときである．このようなベクトルは Θ_λ の同じ行の要素の置換に関してつねに対称である．同じように，一つのベクトルが射影子 A_λ の部分空間に属するとき，これは A_λ-反対称であるといわれる．

図表 $\tilde{\Theta}_\lambda, \Theta_\lambda^p$ から出発すれば，同じようにして $\tilde{S}_\lambda, S_\lambda^p$ 型の対称性と $\tilde{A}_\lambda, A_\lambda^p$ 型の対称性をそれぞれ定義することができる[11]．

はっきり決まった対称性 S_λ^p, S_μ^q をもつ二つのベクトルのうち，対称性が高いベクトルというのは，分割 λ, μ のうちの大きい方に対応するものであると定義する．はっきり決まった反対称性 A_λ^p, A_μ^q をもつ二つのベクトルのうち，反対称性が高いベクトルというのは，分割 λ, μ のうち大きい方に対応するものであると定義する．

このとき，性質 (69) と基本定理からつぎの事実が導き出される：

既約表現 $P^{(2)}$ の空間は S_λ-対称なベクトルをただ一つだけもつ（したがって p を任意に定めた置換とするとき，S_λ^p-対称なベクトルをただ一つもつ）．しかしそれより高い対称性をもつベクトルはない[12]．

またこの空間は $A_{\tilde{\lambda}}$-反対称なベクトルをただ一つだけもつが，それより高い反対称性をもつベクトルはない．

互換の共役類演算子 K_T

各分割 μ にはある一つの共役類と共役類演算子 K_μ が対応する．この演算子のとりうる

---

(11) 置換 P によって S_λ-対称なベクトルはすべて S_λ^p-対称なベクトルに変換され，A_λ-反対称なベクトルはすべて A_λ^p-反対称なベクトルに変換される（関係 (76) を参照）．

S_λ, A_λ 型の対称性と $\tilde{S}_\lambda, \tilde{A}_\lambda$ 型の対称性とのあいだにはこの種の対応がない．特殊な置換 q を

$$\tilde{\Theta} = q\Theta_{\tilde{\lambda}}$$

によって定めると，$\tilde{S}_\lambda, \tilde{A}_\lambda$ 型の対称性はそれぞれ S_λ^q, A_λ^q 型の対称性と同値である．

(12) もっと一般に，不等式

$$\mu > \lambda, \qquad \tilde{\mu} < \tilde{\lambda}$$

のうち，どちらか一つを満たす分割 μ をとるとき，S_μ-対称なベクトルは一つも存在しない．

固有値 $k_\mu^{(\lambda)}$ は，$\mathcal{S}_n$ のいろいろな既約表現 $\mathrm{P}^{(\lambda)}$ に対応する．これらは n の分割 λ に現われる整数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_h$ の関数である（注意；二つの分割が異なるとき，特定の演算子 K_μ の固有値のうちこれらの分割に対応する固有値が異なるとは限らない：$\lambda \neq \lambda'$ から $k_\mu^{(\lambda)} \neq k_\mu^{(\lambda')}$ とは必ずしも言えない）．特別な場合として，互換の共役類演算子

$$K_T \equiv K_{[2\ 1^{n-2}]} \equiv \sum_{i<j} (ij)$$

を考えよう．K_T はすべての置換と交換し，したがって

$$k_T^{(\lambda)} I_\lambda = K_T I_\lambda = S_\lambda K_T \widetilde{A}_\lambda$$

であることに注意し，(67) を考えに入れれば，$k_T^{(\lambda)}$ は h_λ 型の互換（対称な対）の個数と v_λ 型の互換（反対称な対）の個数との差に等しいことが容易に示される．すなわち

$$k_T^{(\lambda)} = \sum_{i=1}^{h} \frac{\lambda_i(\lambda_i-1)}{2} - \sum_{j=1}^{k} \frac{\tilde{\lambda}_j(\tilde{\lambda}_j-1)}{2}. \tag{80}$$

§ 18. スピン 1/2 をもつ n 個のフェルミ粒子系

スピン 1/2 の同種粒子 n 個によってつくられる状態の対称性

定理. n 個の同種 1/2 スピンによってつくられ，全スピン $(S\,M)$ をもつベクトルの空間には，$\mathcal{S}_n$ の一つの既約表現が結びつけられる．この既約表現のヤングの図形は，整数 n の分割 $[n/2+S, n/2-S]$ に対応する（たかだか 2 行のヤングの図形）．

系 I．$n = 2$ ならば，1 個の反対称状態，状態 $S = 0$ と，3 個の線形独立な対称状態，状態 $S = 1$ がある．

系 II．$n > 2$ ならば，反対称状態はなく，全部で $n+1$ 個の線形独立な完全対称状態が存在する．すなわち，全スピンが最大 $(S = n/2)$ になるような $2S+1 \equiv n+1$ 個の状態である．

証明

n 個の 1/2 スピンによってつくられる空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ は 2^n 次元空間である．s_z の固有値 $+1/2$, $-1/2$ に対応する i 番目の個別的なスピンの力学的状態をそれぞれ u_i, v_i によって表わす．

n 個のベクトル u または v の積を，あらゆる方法でとれば，$\mathcal{E}^{(s)}$ のなかの直交規格化基底が得られる．たとえば

$$\zeta_M \equiv u_1 u_2 \cdots u_\nu v_{\nu+1} \cdots v_n$$

はこの基底に属するベクトルの一つである．これはまた，全スピン

$$\boldsymbol{S} = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{s}_i$$

の成分 S_z の固有ベクトルの一つであり，対応する固有値は $M = \nu - n/2$ である．ζ_M にあらゆる置換を施せば，全部で ${}_n\mathrm{C}_\nu = [n!/(n/2+M)!\,(n/2-M)!]$ 個の異なるベクトル

ができ，これらは固有値Mの部分空間を張る．これらのベクトルはいずれも$n/2+M$個のベクトルuと$n/2-M$個のベクトルvを含む．

これらが張る空間はまた，S^2のとりうるいろいろな固有値に対応する直交部分空間に再分割される．量子数Sは$n/2-|M|+1$個の固有値$|M|, |M|+1, \cdots, n/2$をとることができる．全スピン（SM）のベクトルによってつくられる部分空間を$\mathcal{E}^{(s)}(SM)$で表わす．S^2とS_zはすべての置換と交換するから，それぞれ$\mathcal{S}_n$の表現を定める．さらに，S_+とS_-がすべての置換と交換するから，Sの同じ値に対応する二つの部分空間によって定められる表現は同値である．

ここで系IIを証明しよう（系Iは自明である）．そのためには，空間$\mathcal{E}^{(s)}$の直交規格化基底のベクトルから，反対称状態の空間と対称状態の空間への射影を吟味すればよい．この吟味は，上に定めた基底ベクトルについて行なえば特に容易である．$n>2$であるから，この基底に属する任意のベクトルζは，同じ状態uまたはvにある個別的スピンを少なくとも二つ含む．具体的に考えるため，ζが因数u_iu_jを含むと仮定しよう．$A=A(1-(ij))/2$，$(1-(ij))u_iu_j/2=0$であるから，必ず$A\zeta=0$である．一方，固有値Mの部分空間に属する基底ベクトルの線形結合のうち，完全に対称なものはただ一つだけ存在する．すなわち，これら${}_nC_\nu$個の基底ベクトルの和である．この性質はMのとりうるすべての値について成り立つから，この完全に対称なベクトルは必ず全スピンの最大値$S=n/2$に対応する．これで系IIが証明された．

ヤングの図形Y_λが二つより多くの行を含むときには，Aについてなされた上記の証明を反対称化演算子$\tilde{A}_\lambda$について繰り返すことができ，その結果$\tilde{A}_\lambda\zeta=0$となる．したがって，$\mathcal{E}^{(s)}$において定められた$\mathcal{S}_n$の表現の既約成分は，たかだか2行のヤングの図形で表わされる．

この条件に適するnの分割を$\lambda=[\lambda_1\lambda_2]$とする．既約成分$\mathrm{P}^{(\lambda)}$の個数は，$I_\lambda|\rangle\equiv S_\lambda\tilde{A}_\lambda|\rangle$という型のベクトルから選ばれる線形独立なものの個数に等しい．後者を数えるためには，つぎの図表Θ_λ

1	2		λ_2	λ_2+1		λ_1
λ_1+1	λ_1+2		$\lambda_1+\lambda_2$			

を調べればよい．n個の1/2スピンの集合は二つの異なる集合に分けられる．一つは第1行の（$\lambda_1-\lambda_2$）個の要素$\lambda_2+1, \lambda_2+2, \cdots, \lambda_1$の集合であり，これらは第2行に《相手》をもたない．もう一つは同じ列にある二つの要素の組をλ_2個合わせたものである．これらの集合の全スピンをそれぞれS_1, S_2とする．このとき

$$S=S_1+S_2.$$

第一の集合に属するスピンの置換は $(\lambda_1-\lambda_2)!$ 個あるが，これらに関して対称な状態への射影子を $S^{(\lambda_1-\lambda_2)}$ とする．明らかに

$$I_\lambda = S_\lambda S^{(\lambda_1-\lambda_2)} \widetilde{A}_\lambda.$$

ところが，定義そのものによって，$\widetilde{A}_\lambda$ は第二の集合に含まれる各組を1重項状態へ射影する．この集合のベクトルでこの性質をもつものはただ一つしかなく（系I），それはスピン $S_2=0$ に対応する．$S^{(\lambda_1-\lambda_2)}$ について考えると，これによって第一の集合のベクトルは $(2S_1+1)$ 次元の空間に射影され，この空間は S_1 のとりうる最大値すなわち $(\lambda_1-\lambda_2)/2$ に対応する（系II）．それゆえ $S^{(\lambda_1-\lambda_2)}\widetilde{A}_\lambda$ は，全スピンの値 $S=(\lambda_1-\lambda_2)/2$ に対応する $(2S+1)$ 次元の空間に射影する．射影子 S_λ は S と交換するから，この空間のベクトルに対する S_λ の作用は，これらを全部0にしてしまうか，または同じ全スピン $(\lambda_1-\lambda_2)/2$ をもつベクトルに変換する．第一の可能性は除外される．なぜなら，そのようなときには $\mathcal{E}^{(s)}$ のなかに全スピン $(\lambda_1-\lambda_2)/2$ のベクトルを見いだすことができなくなるからである．第二の可能性から，さきに述べた定理が出てくる．　（証明終）

完全に反対称なベクトルをつくること

1/2 スピンをもつ n 個のフェルミ粒子の力学的状態の空間は，さきに定義した空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ と軌道変数の空間 $\mathcal{E}^{(0)}$ とのテンソル積 $\mathcal{E}^{(0)}\otimes\mathcal{E}^{(s)}$ によってつくられる．$\mathcal{E}^{(0)}$ は互いに直交する部分空間 $\mathcal{E}^{(0)}(\sigma\mu)$ に再分割され，これらは群 $\mathcal{S}_n$ に関して既約不変である．$\mathcal{E}^{(0)}(\sigma\mu)$ はある既約表現 $\mathsf{P}^{(\mu)}$ に結びつけられる．$\mathcal{S}_n$ の同じ既約表現に結びつけられたいくつかの空間は，添字 σ によって区別される．完全に反対称なベクトルから成る完全直交列を一つつくるためには，このことを各部分空間 $\mathcal{E}^{(0)}(\sigma\mu)\otimes\mathcal{E}^{(s)}$ で行なえばよい．このような部分空間のなかにある線形独立な反対称ベクトルの個数は，この空間において定義された表現のなかに成分 A が現われる回数，したがって（§17）$\mathcal{E}^{(s)}$ において定義された表現の分解のなかに，$\mathsf{P}^{(\mu)}$ に結びつけられた既約表現が現われる回数に等しい．Y_μ が二つより多くの列を含むとき，それは存在しない．Y_μ がたかだか二列から成るとき，

$$\mu = [2^{n/2-S}1^{2S}] \tag{81}$$

と置けば，さきに述べた定理により，それは $(2S+1)$ 個存在し，われわれが求める反対称ベクトルは，全スピン (SM) に対応する $\boldsymbol{S}^2$ の固有ベクトルである $(M=-S, -S+1, \cdots, S)$．

スピンに無関係なスカラー・オブザーバブル．*LS* 結合

Q がスピンに無関係なスカラー・オブザーバブルであるとき，それは空間 $\mathcal{E}^{(0)}$ のオブザーバブルとみなされ，回転および軌道変数だけの置換に関して不変である．すなわち

$$[Q, L] = 0, \qquad [Q, P^{(0)}] = 0.$$

空間 $\mathcal{E}^{(0)}$ は回転群および置換群に関して既約な $(2L+1)d_\mu$ 次元の部分空間 $\mathcal{E}^{(0)}(\tau L\mu)$

の直和である[18]．Lは角運動量の量子数，μは置換群の表現$\mathrm{P}^{(\mu)}$に結びつけられた分割であり，τは補助の量子数で，同値な部分空間を互いに区別するためのものである．特に$\mathcal{E}^{(0)}(\tau L\mu)$を適当に選べば，その一つ一つにおいて$Q$をある定数$q_\tau^{(L\mu)}$に等しくすることができる（§9参照）．

固有値$q_\tau^{(L\mu)}$に対応するQの固有ベクトルは，部分空間$\mathcal{E}^{(0)}(\tau L\mu)\otimes\mathcal{E}^{(s)}$の反対称ベクトルである．上に示したことにより，これをつくることができるのは，Y_μがたかだか二つの列から成るときだけである．この場合，分割μは量子数Sを与えることによって明確に定められる（式(81)）．そこで，$\mathcal{E}^{(0)}(\tau L\mu)\otimes\mathcal{E}^{(s)}$の反対称ベクトルがつくる空間は，粒子系の全スピンがとるはっきり決まった値Sに対応する．これは$(2L+1)(2S+1)$次元の部分空間$\mathcal{E}(\tau LS)$であり，このなかに全軌道角運動量と全スピンの固有ベクトル

$$|\tau LSM_LM_S\rangle \qquad (M_L=-L,\cdots,+L\,;\ M_S=-S,\cdots,+S)$$

を選んで標準基底$\{\boldsymbol{L}^2\boldsymbol{S}^2L_zS_z\}$をつくることができる．

---

(18) $\mathcal{E}^{(0)}(\tau L\mu)$は回転群だけに関しては可約であり，$d_\mu$個の同値な既約部分空間の直和である（$d_\mu$＝表現$\mathrm{P}^{(\mu)}$の次数）．また，それは群$\mathcal{S}_n$に関しても可約であり，$(2L+1)$個の同値な既約部分空間の直和である．

第 1, 2 巻 の 索 引

ア 行

カ 行

サ 行

タ 行

マ　行

訳者紹介

小出昭一郎（こいで しょういちろう）

1950年	東京大学理学部物理学科卒業
1957～8年	英国ブリストル大学へ留学
1962～4年	スイスのジュネーブ大学招聘教授
現在	東京大学教養学部教授，理学博士
専攻	物性理論
主要著訳書	「物理数学Ⅰ」（朝倉書店） 「量子論」，「量子力学Ⅰ，Ⅱ」（裳華房） ハイゼンベルク「量子論の物理的基礎」（共訳，みすず書房） スレーター「現代物理学」（共訳，好学社）

田村二郎（たむら じろう）

1943年	東京帝国大学理学部数学科卒業 名古屋帝国大学大学院特別研究生， 第一高等学校教授などを経て
1961年	東京大学教養学部教授
1968年	東京大学教養学部長，翌年退官．理学博士
専攻	解析関数論
主要著書	「基礎課程微分積分学」（共著，裳華房） 「解析関数」（裳華房）

メシア量子力学 2

1972年2月15日　第1刷発行
1974年9月2日　第3刷発行

検印省略

著者　A.　メシア
訳者　小出昭一郎
　　　田村二郎
発行所　東京図書株式会社
本社　東京都新宿区本塩町23　タナカビル
　　　振替 東京 13803 電話(357)0636～7
営業所　東京都文京区水道2－5（カキビル）
　　　電話（814）7818～9

3042-3021-5160